

Tieftemperatureigenschaften einer dotierten Spin $S = 1$ Kette – Integrables Modell –

dem Fachbereich Physik
der Universität Hannover

zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

von

Dipl. Phys. Constantin Sobiella
geboren am 24.11.1972 in Heidelberg

Referent : Prof. Dr. H. Frahm
Korreferent : Prof. Dr. M. Lewenstein
Tag der Promotion : 4. Februar 2002

Meinen Eltern

Low Temperature Properties of an Integrable Doped Spin $S = 1$ Chain

Abstract

In this thesis the low temperature properties of an exactly solvable anti-ferromagnetic spin $S = 1$ chain doped with mobile spin $S = 1/2$ impurities will be considered. The doped spin $S = 1$ chain is a generalization of the super-symmetric t - J model and interpolates between the isotropic spin $S = 1/2$ HEISENBERG model and the spin $S = 1$ TAKHTAJAN-BABUJIAN chain for the completely doped case and vanishing impurity concentration $x_h = 0$ respectively.

Within the framework of the *Quantum Inverse Scattering Method* the doped spin $S = 1$ chain can be built from a $gl(2|1)$ -invariant solution of the graded YANG-BAXTER equation corresponding to the atypical $[1]_+$ -representation of the super-algebra $gl(2|1)$. The associated transfer matrix is diagonalized by means of a nested algebraic BETHE ansatz. Using a generalized fusion procedure the Hamiltonian and its eigenvalues are constructed.

By applying TAKAHASHI's string hypothesis we deduce in the third part the thermodynamic BETHE ansatz equations. Performing the low temperature limit we can determine ground state properties and the phase diagram depending on an external magnetic field H and the impurity concentration x_h . The system shows spin-charge separation. We also examine the magnetic properties of the model. For sufficiently high magnetic fields and finite impurity concentration we find a new metallic phase with a finite gap for the magnetic excitations. In this phase the magnetization curve shows a plateau that is only a fraction of the saturation magnetization and can be tuned by the impurity concentration x_h . The critical behavior near the edges of the plateau is also analyzed.

To study the dynamical properties e.g. the low lying magnetic excitations we calculate the *Finite Size Correction* of the model. Using predictions of *Conformal Field Theory* we can identify the effective low temperature theories as well as the scaling dimensions which determine the asymptotic behavior of the correlation functions at criticality. In the plateau phase no magnetic excitations are found to exist.

Keywords: correlated electrons; generalized supersymmetric t - J -model; magnetization plateaus.

PACS: 75.10.Jm; 75.10.Lp; 71.10.Pm.

Tieftemperatureigenschaften einer dotierten Spin $S = 1$ -Kette – Integrables Modell –

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden die Tieftemperatureigenschaften einer integrablen, antiferromagnetischen Spin $S = 1$ -Kette, die mit frei beweglichen Spin $S = 1/2$ Störstellen dotiert ist, untersucht. Dabei handelt es sich um ein verallgemeinertes supersymmetrisches t - J -Modell, das zwischen dem isotropen $S = 1/2$ HEISENBERG-Modell und der $S = 1$ TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette im Falle vollständiger Dotierung bzw. verschwindender Störstellenkonzentration $x_h = 0$ interpoliert.

Im Rahmen der Quanten-Inversen-Streumethode konstruiert man die dotierte $S = 1$ -Kette aus einer $gl(2|1)$ -invarianten Lösung der YANG-BAXTER Gleichung, die zu der *atypischen* $[1]_+$ -Darstellung der Superalgebra $gl(2|1)$ korrespondiert. Die dazugehörige Transfermatrix wird mit Hilfe des algebraischen BETHE-Ansatz diagonalisiert. Den HAMILTON-Operator sowie die Energie- und Impulseigenwerte lassen sich mittels einer verallgemeinerten Fusionsmethode bestimmen.

Unter Verwendung von TAKAHASHIS *String*-Hypothese werden im dritten Abschnitt die thermodynamischen BETHE-Ansatz Gleichungen abgeleitet. Im Grenzfall tiefer Temperaturen können die Grundzustandseigenschaften sowie das Phasendiagramm in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld H und der Störstellenkonzentration x_h berechnet werden. Das Modell zeigt Spin-Ladungstrennung. Ferner werden auch die magnetischen Eigenschaften des Systems analysiert. Dabei stellt man fest, daß sich das System für mittlere Magnetfelder H und endlicher Störstellenkonzentration x_h in einer metallische Phase befindet, d.h. eine endliche Anregungslücke für die magnetischen Moden vorliegt. In dieser Phase weist daher die Magnetisierungskurve ein Plateau auf, dessen Wert sich in Abhängigkeit von x_h kontinuierlich verändern läßt und nur einen Bruchteil der Sättigungsmagnetisierung beträgt. Abschließend wird noch das kritische Verhalten in der Nähe der Plateau-Endpunkte analysiert.

Um die dynamischen Eigenschaften wie z. B. die niederenergetischen magnetischen Anregungen zu bestimmen, benötigt man die *Finite-Size*-Korrekturen des Systems. Mit Hilfe von Vorhersagen der konformen Feldtheorie ist man in der Lage, die entsprechenden effektiven Tieftemperaturtheorien sowie die Skalendimensionen von diversen physikalischen Operatoren zu berechnen, die das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktion am kritischen Punkt festlegen. Man stellt fest, daß in den Plateau-Phasen keine niederenergetischen magnetischen Anregungen existieren.

Schlagwörter: Korrelierte Elektronen; verallgemeinertes supersymmetrische t - J -Modell; Magnetisierungsplateaus.

PACS: 75.10.Jm; 75.10.Lp; 71.10.Pm.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1. Einleitung	1
Kapitel 2. Konstruktion des integrablen Modells	5
2.1 Graduierte Vektorräume und Operatoren	6
2.2 Graduierte Quanten-Inverse-Streumethode	7
2.2.1 $gl(2 1)$ -invariante Lösungen der Yang-Baxter-Gleichung	10
2.3 Algebraischer Bethe-Ansatz	11
2.4 Hamilton-Operator der dotierten Spin $S = 1$ -Kette	15
Kapitel 3. Statische Tieftemperatureigenschaften des integrablen Modells	19
3.1 Thermodynamische Bethe-Ansatz-Gleichungen	21
3.1.1 Diskrete Bethe-Ansatz-Gleichungen	21
3.1.2 Logarithmische Bethe-Ansatz-Gleichungen	26
3.1.3 Thermodynamischer Limes	27
3.2 Tieftemperatur-Phasendiagramm	32
3.2.1 Phasenbereich $\mu < -H/2$	33
3.2.2 Phasenbereich $-H/2 < \mu < H/2$	40
3.2.3 Phasenbereich $\mu > H/2$	43
3.2.4 Vergleich mit dem supersymmetrischen t - J -Modell	44
3.3 Magnetisierungsplateaus	46
Kapitel 4. Dynamische Tieftemperatureigenschaften des integrablen Modells	53
4.1 Konforme Feldtheorie	54
4.1.1 Kritisches Verhalten und Skaleninvarianz	55
4.1.2 Die konforme Gruppe	55
4.1.3 Primäre Felder und Korrelationsfunktionen	57
4.1.4 Virasoro-Algebra	59
4.2 Finite-Size-Korrekturen	62
4.3 Tomonaga-Luttinger-Phase B1	67
4.4 Plateauphase C	72
4.5 Tomonaga-Luttinger-Phase B2	75
Kapitel 5. Zusammenfassung und Ausblick	79
Anhang A. Die Superalgebra $gl(2 1)$	81

Anhang B. Finite-Size-Korrekturen	85
Anhang C. Freies Boson	91
Literaturverzeichnis	95

KAPITEL 1

Einleitung

In der theoretischen Festkörperphysik standen in den letzten Jahren ungeordnete und stark wechselwirkende Systeme aufgrund ihrer vielfältigen und ungewöhnlichen Tieftemperatureigenschaften wie etwa Hochtemperatursupraleitung [1], fraktionierter Quantenhalbleiter [2] oder schwere Fermionen [3] im Mittelpunkt des Interesses. Eine besondere Rolle bei der Identifizierung der diesen Phänomenen zugrundeliegenden Mechanismen und Strukturen spielen stark vereinfachte, quantenmechanische Modelle in $(1 + 1)$ -Raumzeit-Dimensionen. In diesen Fällen verfügt man nicht nur über weit entwickelte analytische und numerische Methoden wie beispielsweise Bosonisierung [4], Konforme Feldtheorie [5, 6] und *Density-Matrix-Renormalization-Group* [7, 8], sondern mittlerweile auch wegen der immensen technischen Fortschritte auf dem Gebiet der Nanotechnologie sowie neuartiger Verbindungen und Substanzen [9, 10] über die zur Verifikation benötigten Experimente [11]. Die bis *dato* wohl spektakulärsten Tieftemperatureffekte, die man in quasi-eindimensionalen Systemen nachweisen konnte, sind alle nichtperturbativer Natur, wie etwa die Spinonstreu Zustände im $S = 1/2$ HEISENBERG-Antiferromagnet [12] oder das Phänomen der Spin-Ladungstrennung im HUBBARD-Modell [13, 14], und können daher nicht mit störungstheoretischen Methoden untersucht werden. In exakt lösbaren Systemen dagegen kann eine Vielzahl von relevanten Größen wie etwa die Freie Energie F analytisch hergeleitet werden. Die besondere Bedeutung der so gewonnenen Ergebnisse liegt nun darin, daß sie sich einerseits mit Hilfe des Universalitätsklassenkonzepts auf andere Modelle übertragen lassen und andererseits eine Überprüfung von Näherungsverfahren erlauben, die bei zwei- bzw. dreidimensionalen Problemen angewandt werden.

Eine spezielle Klasse von integrablen Systemen bilden die BETHE-Ansatz-lösbaren Modelle. Hier läßt sich die N -Teilchendynamik auf eine Zweikörperdynamik reduzieren, d.h. die N -Teilchenstreu matrix ist äquivalent zu dem Produkt von Zweiteilchen-Streumatrizen. Diese Eigenschaft führt auf eine Selbstkonsistenzgleichung für die Zweiteilchen-Streumatrix, die sogenannte YANG-BAXTER-Gleichung [15]. Im Jahre 1931 gelang es H. BETHE mit Hilfe einer Vielteilchenwellenfunktion den Grundzustand des isotropen $S = 1/2$ HEISENBERG-Antiferromagneten für ein System der Länge L zu berechnen, was auf die nach ihm benannten (diskreten) BETHE-Ansatz-Gleichungen führte [16]. Ausgehend von diesem Gleichungssystem konnte 1938 L. HULTHÉN die Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ bestimmen [17], während 1962 J. DES CLOIZEAUX und J. J. PEARSON das niederenergetische Anregungsspektrum untersuchten [18]. Die richtige physikalische Interpretation der Tieftemperatur-Anregungsmoden, daß es sich dabei nicht um ein antiferromagnetisches Magnon sondern um Streuzustände zweier $S = 1/2$ -Spinonen handelt, wurde erst 1981 von L. D. FADDEEV und L. A. TAKHTAJAN gegeben [12]. Neben der XXX-Kette konnten auch weitere Spin-Modelle auf diese Weise gelöst werden, wie

etwa der anisotrope XXZ-HEISENBERG-Antiferromagnet von den Gebrüdern C. N. und C. P. YANG im Jahre 1966 [19, 20, 21] oder 1972/73 das XYZ-Modell von R. J. BAXTER [22] sowie J. D. JOHNSON, S. KRINSKY und B. M. McCoy [23].

Der Koordinaten-BETHE-Ansatz eignet sich auch zur Lösung eindimensionaler, stark wechselwirkender Systeme von Bosonen und Fermionen. So bestimmten 1963 E. H. LIEB und W. LINIGER die Grundzustands- und C. N. und C. P. YANG 1969 die thermodynamischen Eigenschaften des eindimensionalen BOSE-Gases mit δ -Potential-Wechselwirkung [24, 25]. Im Jahre 1968 leiteten daraus E. H. LIEB und F. Y. WU die Lösung des eindimensionalen HUBBARD-Modells ab [26], dessen thermodynamische Eigenschaften 1972 von M. TAKAHASHI mittels der *String*-Hypothese bestimmt wurden [27]. C. K. LAI führte 1974 ein integrables Quantengas-Modell ein, das dem supersymmetrischen *t*-*J*-Modell entspricht [28]. Im darauffolgenden Jahr berechnete B. SUTHERLAND die BETHE-Ansatz-Gleichungen für ein generalisiertes multi-komponentiges Quantengas und zeigte, daß LAIsche Lösung teilweise inkorrekt war [29]. Ein weiteres zu dieser Klasse gehörendes Modell ist das KONDO-Modell, das 1983 von A. M. TSVELIK und P. B. WIEGMANN sowie von N. ANDREI, K. FURUYA und J. H. LOWENSTEIN gelöst wurde [30, 31].

Ende der siebziger Jahre begründeten E. K. SKLYANIN und L. D. FADDEEV die Quanten-Inverse-Streumethode — eine umfassende Einführung in die grundlegenden Konzepte findet man z.B. in [15]. Ihr Ziel war es, ein quantenmechanisches Analogon zu der klassischen Inversen-Streumethode zu entwickeln, eine Methode, die sehr erfolgreich auf nicht-lineare klassische Probleme wie etwa die KORTEWEG-DEVRIES- oder die nichtlineare SCHRÖDINGER-Gleichung angewandt wurde [32]. Die klassische Inverse-Streumethode basiert darauf, daß die lokalen (physikalischen) Felder, die einer nichtlinearen Evolutionsgleichung genügen, auf sogenannte Streudaten eines Hilfsproblems abgebildet werden können, deren Zeitentwicklung durch eine lineare Differentialgleichung gegeben ist. Die nichtlineare Evolutionsgleichung für die physikalischen Felder läßt sich dann wie folgt lösen: Man bildet für $t=0$ die Anfangsbedingungen der lokalen Felder auf die entsprechenden Streudaten ab, benutzt deren lineare Zeitentwicklung und wendet abschließend die Inverse-Abbildung an, um aus den Streudaten für $t > 0$ wieder die dazu korrespondierenden Felder zu gewinnen. Eine zentrale Rolle in diesem Formalismus spielt die sogenannte Monodromiematrix, die die lineare Evolution der Streudaten bestimmt und deren Elemente über einfache POISSON-Klammern miteinander verknüpft sind.

Die Quanten-Inverse-Streumethode läßt sich aus der klassischen Inversen-Streumethode folgendermaßen ableiten: Ersetzt man die POISSON-Klammern durch Kommutatoren, so entsprechen den Matricelementen quantenmechanische Operatoren, die die sogenannte YANG-BAXTER-Algebra aufspannen und die die Quanten-Monodromiematrix bilden. Ordnet man die Strukturkonstanten dieser Algebra als Matrix an, die im weiteren Verlauf als \mathcal{R} -Matrix bezeichnet wird, so erfüllt diese die bekannte YANG-BAXTER-Gleichung. Zusammen mit der dazu assoziierten YANG-BAXTER-Algebra bildet die \mathcal{R} -Matrix die Grundlage der Quanten-Inversen-Streumethode. Im allgemeinen enthält die YANG-BAXTER-Algebra eine nicht-triviale kommutierende Unter-algebra, die von der Spur der Quanten-Monodromiematrix generiert wird. Die Elemente dieser Subalgebra lassen sich als kommutierende Operatoren eines physikalischen Systems interpretieren, wobei ein

Element mit dem HAMILTON-Operator identifiziert wird, meistens die logarithmische Ableitung der Quanten-Monodromiematrix. Die gesamte kommutierende Subalgebra und somit auch der HAMILTON-Operators des physikalischen Systems läßt sich mit Hilfe des algebraischen BETHE-Ansatzes diagonalisieren, der nur auf den Kommutatorrelationen der YANG-BAXTER-Algebra und der Existenz eines Pseudovakuums beruht.

Das Quanten-Inverse-Streuprobblem, d.h. die Bestimmung der Inversen-Abbildung, die den Zusammenhang zwischen den lokalen, physikalischen Operatoren und den Elementen der Quanten-Monodromiematrix herstellt, konnte erst vor kurzem für eine bestimmte Klasse von Modellen gelöst werden [33]. Bis dato ließen sich daher im Rahmen der Quanten-Inversen-Streumethode ausschließlich globale (statische), aber keine lokalen (dynamische) Eigenschaften des zugrundeliegenden Systems bestimmen, auch wenn es per Konstruktion exakt lösbar ist. In den achtziger Jahren wurde ein Verfahren entwickelt, das Ideen und Vorhersagen der konformen Feldtheorie und von *Finite-Size*-Untersuchungen kombiniert, mit dessen Hilfe sich das asymptotische Verhalten von Korrelationsfunktionen eines kritischen Systems für große Abstände und große Zeiten berechnen läßt [6, 34, 35, 36, 37]. Bekannte, physikalisch relevante Modelle, die mittels der Quanten-Inversen-Streumethode und des algebraischen BETHE-Ansatzes konstruiert und gelöst werden können, sind unter anderem die unterschiedlichen Spin $S = 1/2$ -HEISENBERG-Ketten [15], das supersymmetrische t - J -Modell [38] und die Spin S -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Ketten [39, 40, 41].

In dieser Arbeit soll eine dotierte Spin $S = 1$ -Kette betrachtet werden. Ausgehend von einer $gl(2|1)$ -invarianten Lösung der graduierten YANG-BAXTER-Gleichung, die zu der *atypischen* $[1]_+$ -Darstellung der Superalgebra $gl(2|1)$ korrespondiert [42], läßt sich im folgenden Kapitel mit Hilfe der Quanten-Inversen-Streumethode und des algebraischen BETHE-Ansatzes ein verallgemeinertes, supersymmetrisches t - J -Modell konstruieren, nämlich eine exakt lösbare Spin $S = 1$ -Kette, die mit frei beweglichen Spin $S = 1/2$ -Störstellen dotiert ist. Zunächst wird das Konzept graduierter Vektorräume und Superalgebren vorgestellt, das die korrekte Behandlung der bosonischen und fermionischen Modellfreiheitsgrade garantiert — im Fall der dotierten Spin $S = 1$ -Kette sind die Tripletzustände bosonischer und die Doubletzzustände fermionischer Natur. Die diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen lassen sich analog zum supersymmetrischen t - J -Modell mittels eines iterierten (*Nested*), algebraischen BETHE-Ansatzes ableiten. Der HAMILTON-Operator der dotierten Spin $S = 1$ -Kette und die dazugehörigen Energie- und Impulseigenwerte bestimmt man mit Hilfe eines verallgemeinerten Fusionsverfahrens [43, 44, 45].

Im dritten Kapitel werden die statischen Tieftemperatureigenschaften der dotierten Spin $S = 1$ -Kette in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration und einem äußeren Magnetfeld untersucht. Um den thermodynamischen Limes (Systemgröße $L \rightarrow \infty$) der BETHE-Ansatz-Gleichungen sowie der Energie- und Impulseigenwerte kontrolliert durchführen zu können, wird die von M. TAKAHASHI und C. N. und C. P. YANG entwickelte Methode des thermodynamischen BETHE-Ansatzes auf das Modell angewandt [27, 46]. Damit lassen sich zwei äquivalente, nichtlineare, gekoppelte Integralgleichungssysteme für die sogenannten *Dressed-Energies* ableiten, die man auch als thermodynamische BETHE-Ansatz-Gleichungen bezeichnet. Die *Dressed-Energies* lassen sich als Quasiteilchenbänder interpretieren, und man findet, daß für beliebige Störstellenkonzentrationen und äußere Magnetfelder nur maximal drei dieser Quasiteilchenbänder masselose Anregungen besit-

zen können. Für tiefe Temperaturen vereinfachen sich die thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen weiter, und man ist in der Lage, das magnetische Grundzustands-Phasendiagramm des Modells in Abhängigkeit von dem äußeren magnetischen Feld und der Störstellenkonzentration bzw. des chemischen Störstellenpotentials zu berechnen. Bei konstanter Störstellenkonzentration und mittleren Magnetfeldern tritt ein nicht-triviales Plateau in der Magnetisierungskurve auf, d.h. der Grundzustand in dieser Phase korrespondiert nicht zu dem ferromagnetisch geordneten Zustand. Das besondere daran ist, daß sich der Wert dieses Plateaus kontinuierlich in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration verändern läßt [47], im Gegensatz zu den bisher bekannten Plateauphasen in diversen Spinsystemen [48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56]. Mittlerweile wurde ein ähnliches Verhalten bei verallgemeinerten HUBBARD-Leitern beobachtet [57, 58].

Gegenstand des vierten Kapitels sind die dynamischen Eigenschaften der dotierten Spin $S = 1$ -Kette bei tiefen Temperaturen, insbesondere der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen und der damit verbundenen magnetischen Anregungen. Dies geschieht mit der bereits erwähnten, auf konformer Feldtheorie und *Finite-Size-Scaling* basierenden Methode [6, 34, 35, 36, 37]. Im ersten Abschnitt werden dazu die im weiteren Verlauf benötigten Grundlagen der konformen Feldtheorie aufgeführt und kurz erläutert. Danach werden die *Finite-Size*-Korrekturen der dotierten Spin $S = 1$ -Kette mit Hilfe der EULER-MACLAURIN-Summenformel berechnet. Das asymptotische Verhalten der physikalischen Korrelationsfunktionen für große Abstände und tiefe Temperaturen sowie die Skalendimension und der konforme Spin des korrespondierenden physikalischen Operators lassen sich aus den $1/L$ -Korrekturen des Anregungsspektrums bestimmen [13, 14]. Von besonderem Interesse ist das Verhalten des \hat{S}^z -Operators, da dieser an das äußere Magnetfeld koppelt, das bei konstanter Störstellenkonzentration der einzige freie, externe Parameter des Modells ist. Man findet, daß in der Nähe der Plateauphasen die magnetischen Anregungen massiv werden, da der \hat{S}^z -Operator an diesen Stellen relevant wird. Dieses Verhalten der niederenergetischen magnetischen Anregungen läßt sich im Rahmen eines SINE-GORDON-Modells vollständig erklären.

Abschließend werden die Ergebnisse noch einmal zusammenfassend dargestellt und ein kurzer Ausblick auf offen gebliebene Fragestellungen gegeben.

KAPITEL 2

Konstruktion des integrablen Modells

In diesem Kapitel soll mittels der graduierten Quanten-Inversen-Streumethode eine integrable, mit frei beweglichen Spin $S = 1/2$ -Störstellen dotierte Spin $S = 1$ -Kette konstruiert werden, bei der es sich um eine Verallgemeinerung des supersymmetrischen t - J -Modells handelt. Ausgangspunkt der Quanten-Inversen-Streumethode ist im Gegensatz zu dem üblichen Vorgehen bei Streuphänomenen nicht der dem Modell zugrunde liegende HAMILTON-Operator, mit dessen Hilfe man dann die entsprechenden Streuamplituden berechnet, sondern die sogenannte YANG-BAXTER-Gleichung. Diese läßt sich als eine Konsistenzgleichung für die Streumatrizen eines Drei-Teilchen-Streuprozesses auffassen, bei dem die Teilchen nur paarweise miteinander wechselwirken und die Reihenfolge der Stöße keine Rolle spielt. Ausgehend von einer Lösung \mathcal{L} der YANG-BAXTER-Gleichung lassen sich kommutierende Transfermatrizen $\hat{\tau}_L$ eines L -Platz-Vertexmodells konstruieren. Durch logarithmisches Differenzieren von $\hat{\tau}_L$ erhält man den integrablen HAMILTON-Operator $\hat{\mathcal{H}}$ des Modells, der für den Fall, daß \mathcal{L} einen sogenannten *Shift*-Punkt besitzt, sogar lokal ist, d.h. nur Nächste-Nachbar-Wechselwirkungsterme enthält. Die Eigenwerte der Transfermatrizen und damit auch des HAMILTON-Operators werden mittels des algebraischen BETHE-Ansatzes bestimmt [15, 59, 60].

Um integrable Modelle für wechselwirkende Elektronensysteme zu konstruieren, benötigt man supersymmetrische Lösungen der YANG-BAXTER-Gleichung, da dies die korrekte Behandlung der bosonischen und fermionischen Freiheitsgrade garantiert. Man sucht daher \mathcal{L} -Operatoren, die invariant unter einer Superalgebra sind und auf dem Tensorprodukt zweier graduierter Vektorräume operieren, die ihrerseits mit den verschiedenen Darstellungen der Symmetriegruppe verknüpft sind. Das bekannteste Beispiele hierfür ist das $gl(2|1)$ -invariante, supersymmetrische t - J -Modell $\hat{\mathcal{H}}_{t-J}$, das auf der fundamentalen dreidimensionalen $[\frac{1}{2}]_+$ -Darstellung aufbaut [61, 62]. Basierend auf der SUTHERLANDSchen-Lösung von $\hat{\mathcal{H}}_{t-J}$ kann man eine Klasse von $gl(2|1)$ -invarianten Lösungen der YANG-BAXTER-Gleichung konstruieren [29, 44, 45]. Diese Lösungen unterscheiden sich lediglich in der Wahl der Darstellung der $gl(2|1)$ für die lokalen Quantenräumen \mathcal{H}_n : So korrespondiert die dotierte Spin $S = 1$ -Kette zu der *atypischen*, fünfdimensionalen $[1]_+$ -Darstellung der $gl(2|1)$. Der lokale HILBERT-Raum des Modells besteht aus einem bosonischen $su(2)$ -Triplet und einem fermionischen $su(2)$ -Dublett. Die Eigenwerte der zugehörigen Transfermatrizen kann man wie im Fall des supersymmetrischen t - J -Modells mit Hilfe eines iterativen (sogenannten *Nested*) algebraischen BETHE-Ansatzes lösen [28, 29, 38, 63]. Dies führt auf die diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen für die Spektralparameter.

Da der \mathcal{L} -Operator für $[1]_+$ aufgrund der unterschiedlichen Dimensionalität von Hilfs- und Quantenraum kein Permutationsoperator sein kann und damit keinen *Shift*-Punkt besitzt, läßt sich der lokale HAMILTON-Operator der dotierten Spin $S = 1$ -Kette nicht direkt aus \mathcal{L}

berechnen. Mit Hilfe der Fusionsmethode kann man jedoch aus \mathcal{L} einen zusammengesetzten \mathcal{L}^S -Operator konstruieren, der auch im Hilfsraum die fünfdimensionale $[1]_+$ -Darstellung der $gl(2|1)$ aufweist und einen *Shift*-Punkt besitzt [15]. Ausgehend von der aus \mathcal{L}^S abgeleiteten Transfermatrix $\hat{\tau}_L^S$ kann man damit den HAMILTON-Operator der dotierten Spin $S=1$ -Kette und dessen Eigenwerte bestimmen.

2.1 Graduierte Vektorräume und Operatoren

In diesem Abschnitt sollen die grundlegenden Eigenschaften und Zusammenhänge von graduierten Vektorräumen und Superalgebren $gl(n|m)$ erarbeitet werden, um mit Hilfe der Quanten-Inversen-Streumethode auch exakt lösbare Modelle wechselwirkender Elektronen konstruieren zu können [64, 65, 66, 67]. Diese Modelle weisen naturgemäß sowohl fermionische als auch bosonische Freiheitsgrade auf. Der unterschiedliche Charakter der fermionischen bzw. bosonischen Zustände läßt sich in diesem Formalismus durch eine Graduierung berücksichtigen: Man versieht den lokalen Zustandsraum mit einer weiteren Struktur, der sogenannten Parität bzw. dem Grad, die die fermionischen von den bosonischen Freiheitsgraden unterscheidet. Für einen endlich dimensional Vektorraum $\mathcal{V}^{(m|n)}$ mit $\mathcal{V}^{(m|n)} = \mathcal{V}_1 \oplus \mathcal{V}_0$ und $\dim \mathcal{V}_0 = m$, $\dim \mathcal{V}_1 = n$ ist die Parität $[\cdot]$ wie folgt definiert:

$$[\cdot] : \mathcal{V}_i \rightarrow \mathbb{Z}_2; [v_i] = i, v_i \in \mathcal{V}_i \text{ mit } i = 0, 1. \quad (2.1)$$

Einen solchen Vektorraum $\{\mathcal{V}^{(m|n)}, [\cdot]\}$ nennt man einen \mathbb{Z}_2 -graduierten Vektorraum oder Superraum, die beiden Unterräume \mathcal{V}_i sind die homogenen Komponenten von $\mathcal{V}^{(m|n)}$. Die jeweiligen Elemente von \mathcal{V}_0 (\mathcal{V}_1) werden als bosonische (fermionische) bzw. als gerade (ungerade) Zustände bezeichnet.

Ausgehend von dem Zustandsraum $\mathcal{V}^{(m|n)}$ des Modells wird im nächsten Schritt das Konzept der Graduierung auf die Gesamtheit der physikalischen Operatoren, d.h. auf den Endomorphismenring $End(\mathcal{V}^{(m|n)})$ erweitert. Wählt man eine Basis $\mathcal{B}_{\mathcal{V}^{(m|n)}}$ des Superraums $\mathcal{V}^{(m|n)}$ mit einer wohldefinierten Parität, wie z.B. $\mathcal{B}_{\mathcal{V}^{(m|n)}} = \{e_\alpha \in \mathcal{V}^{(m|n)} | \alpha = 1, \dots, n+m; e^\alpha e_\beta = \delta_\beta^\alpha, [e_\alpha] \equiv [\alpha] = 0, \alpha = 1, \dots, n, [\alpha] = 1, \alpha = n+1, \dots, n+m\}$, so kann man die dazu korrespondierende Basis $\mathcal{B}_{End(\mathcal{V}^{(m|n)})} = \{e_\alpha^\beta = e_\alpha e^\beta | \alpha, \beta = 1, \dots, m+n \text{ und } e_\alpha^\beta e_\gamma = e_\alpha \delta_\gamma^\beta\}$ des $(n+m)^2$ -dimensionalen Vektorraums $End(\mathcal{V}^{(m|n)})$ ableiten. Die auf $\mathcal{B}_{End(\mathcal{V}^{(m|n)})}$ definierte Paritätsfunktion $[\cdot]$

$$[\cdot] : \mathcal{B}_{End(\mathcal{V}^{(m|n)})} \rightarrow \mathbb{Z}_2, [e_\alpha^\beta] = [\alpha] + [\beta] \pmod{2}, \alpha, \beta = 1, \dots, m+n, \quad (2.2)$$

induziert eine Graduierung auf $End(\mathcal{V}^{(m|n)})$. Ein Element $A = \sum_{\alpha, \beta} A_\beta^\alpha e_\alpha^\beta \in End(\mathcal{V}^{(m|n)})$ nennt man homogen vom Grad $[A]$, wenn es der Gleichung

$$(-)^{[\alpha]+[\beta]} A_\beta^\alpha = (-)^{[A]} A_\beta^\alpha \quad (2.3)$$

genügt. Da bei der Multiplikation von zwei homogenen Elementen A, B die Homogenität gemäß $[AB] = [A] + [B]$ erhalten bleibt, entspricht der mit der durch (2.2) definierten Parität versehene Endomorphismenring $End(\mathcal{V}^{(m|n)})$ gerade einer \mathbb{Z}_2 -graduierten, assoziativen Algebra [42].

Zusätzlich zu der Parität läßt sich auf den homogenen Elementen von $\{End(\mathcal{V}^{(m|n)}); [\cdot]\}$ eine weitere Struktur definieren, nämlich den Superkommutator $[\cdot, \cdot]_{\pm}$:

$$[A, B]_{\pm} = AB - (-)^{[A][B]} BA. \quad (2.4)$$

Durch lineares Erweitern der Definition (2.4) in beiden Argumenten zu $End(\mathcal{V}^{(m|n)})$, kann man wie üblich aus der Gruppe der invertierbaren Elemente $GL(n|m)$ von $\{End(\mathcal{V}^{(m|n)}); [\cdot]\}$ die dazugehörige LIE-Superalgebra $gl(n|m)$ ableiten [42]. Die für diese Arbeit benötigten Eigenschaften der $gl(2|1)$, wie z.B. die Generatoren, Superkommutatorrelationen oder Darstellungstheorie, sind in Anhang A zusammengestellt [61, 62].

Will man das Konzept der Graduierung auf das L -fache Tensorprodukt $[End(\mathcal{V}^{(m|n)})]^{\otimes L}$ übertragen, so findet man in der Literatur unterschiedliche Definitionen bzw. Notationen für das Tensorprodukt [38, 67]. Um einen möglichst großen Grad an Transparenz zu erreichen, wird in dieser Arbeit explizit zwischen einem normalen (ungraduerten) Tensorprodukt \otimes und dem (graduerten) Super-Tensorprodukt \otimes_S unterschieden. Analog zu dem oben beschriebenen Vorgehen kann man auch die Basis $\mathcal{V}_{[End(\mathcal{V}^{(m|n)})]^{\otimes L}} = \{e_{\alpha_L}^{\beta_L} \otimes \dots \otimes e_{\alpha_1}^{\beta_1} \mid \alpha_i, \beta_i = 1, \dots, m+n \text{ mit } i = 1, \dots, L\}$ von $[End(\mathcal{V}^{(m|n)})]^{\otimes L}$ mit einer Graduierung versehen:

$$[\cdot] : \mathcal{B}_{[End(\mathcal{V}^{(m|n)})]^{\otimes L}} \rightarrow \mathbb{Z}_2 ; [e_{\alpha_L}^{\beta_L} \otimes \dots \otimes e_{\alpha_1}^{\beta_1}] = \sum_{i=1}^L ([\alpha_i] + [\beta_i]) \pmod{2}. \quad (2.5)$$

Die homogenen Elemente $A = A_{\beta_1 \dots \beta_L}^{\alpha_1 \dots \alpha_L} e_{\alpha_L}^{\beta_L} \otimes \dots \otimes e_{\alpha_1}^{\beta_1}$ von $[End(\mathcal{V}^{(m|n)})]^{\otimes L}$ der Parität $[A]$, wobei hier wie im folgenden die EINSTEINSche-Summenkonvention verwendet wird, müssen dann einer generalisierten Form von Gleichung (2.3) genügen:

$$(-)^{\sum_{i=1}^L ([\alpha_i] + [\beta_i])} A_{\beta_1 \dots \beta_L}^{\alpha_1 \dots \alpha_L} = (-)^{[A]} A_{\beta_1 \dots \beta_L}^{\alpha_1 \dots \alpha_L}. \quad (2.6)$$

Im Gegensatz zu dem normalen Tensorprodukt berücksichtigt das Supertensorprodukt \otimes_S die Graduierung von $End(\mathcal{V}^{(m|n)})$ und ist für zwei Elemente A und B wie folgt definiert:

$$(A \otimes_S B)_{\beta_1 \beta_2}^{\alpha_1 \alpha_2} = A_{\beta_1}^{\alpha_1} B_{\beta_2}^{\alpha_2} (-)^{([\alpha_1] + [\beta_1])[\alpha_2]}, \quad (2.7)$$

d.h. es gilt $(A_1 \otimes_S B_1)(A_2 \otimes_S B_2) = A_1 A_2 \otimes_S B_1 B_2$. Neben dem Identitätsoperator I auf $\mathcal{V}^{(m|n)} \times \mathcal{V}^{(m|n)}$, d.h. $I_{\beta_1 \beta_2}^{\alpha_1 \alpha_2} = \delta_{\beta_1}^{\alpha_1} \delta_{\beta_2}^{\alpha_2}$, spielt in der Quanten-Inversen-Streumethode auch der Permutationsoperator Π eine zentrale Rolle. Wegen der Graduierung des Zustandsraumes $\mathcal{V}^{(m|n)}$ sind die Matricelemente von Π gegeben durch

$$\Pi_{\beta_1 \beta_2}^{\alpha_1 \alpha_2} = \delta_{\beta_2}^{\alpha_1} \delta_{\beta_1}^{\alpha_2} (-)^{[\beta_1][\beta_2]} \quad (2.8)$$

und entsprechen somit bosonischen bzw. fermionischen Vertauschungsregeln.

2.2 Graduierte Quanten-Inverse-Streumethode

Ziel der Quanten-Inversen-Streumethode ist die Konstruktion von eindimensionalen exakt lösaren quantenmechanischen Gitter-Modellen. Die zentralen Objekte dieser Methode, wie

z.B. \mathcal{R} -Matrix, \mathcal{L} -Operator, Monodromie-Matrix \mathcal{T}_L und Transfermatrix $\hat{\tau}_L$, operieren auf drei unterschiedlichen Arten von Vektorräumen: Den lokalen Zustandsräumen \mathcal{H}_n korrespondierend zu je einem Gitterpunkt n , dem globalen HILBERT-Raum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \times \dots \times \mathcal{H}_1$ und einem sogenannten Hilfsraum $\mathcal{V}^{(m|n)}$. Um im weiteren Verlauf diese Räume einfacher unterscheiden zu können, werden die Indizes der Quantenräume mit griechischen und die des Hilfsraumes mit lateinischen Buchstaben bezeichnet.

Der Ausgangspunkt der Quanten-Inversen-Streumethode für wechselwirkende Elektronensysteme sind $(\mathcal{R}, \mathcal{L}_n)$ -Paare, die der lokalen, gradierten YANG-BAXTER-Gleichung genügen [15, 59, 60]:

$$\mathcal{R}(\lambda - \mu) \left[\mathcal{L}_n(\lambda) \otimes_S \mathcal{L}_n(\mu) \right] = \left[\mathcal{L}_n(\mu) \otimes_S \mathcal{L}_n(\lambda) \right] \mathcal{R}(\lambda - \mu). \quad (2.9)$$

Dabei soll einerseits \mathcal{R} eine invertierbare Matrix vom Grad Null sein, d.h. $[\mathcal{R}] = [\mathcal{R}_{b_1 b_2}^{a_1 a_2}] = [a_1] + [a_2] + [b_1] + [b_2] = 0$, die auf dem Vektorraum $\mathcal{V}^{(m|n)} \times \mathcal{V}^{(m|n)}$ operiert, und andererseits sind die \mathcal{L}_n operatorwertige $(m+n) \times (m+n)$ -dimensionale Matrizen, deren Matrixelemente auf dem jeweiligen lokalen HILBERT-Raum \mathcal{H}_n wirken. Ferner hängen \mathcal{R} -Matrix sowie \mathcal{L}_n -Operatoren noch von einem sogenannten Spektralparameter λ ab, und das in (2.9) auftretende Supertensorprodukt \otimes_S bezieht sich ausschließlich auf die beiden Hilfsräume. Verwendet man die Komponentenschreibweise für Gleichung (2.9), so erhält man:

$$\begin{aligned} & \mathcal{R}(\lambda - \mu)_{c_1 c_2}^{a_1 a_2} \mathcal{L}_n(\lambda)_{b_1, \gamma_n}^{c_1, \alpha_n} \mathcal{L}_n(\mu)_{b_2, \beta_n}^{c_2, \gamma_n} (-)^{([c_1] + [b_1])[c_2]} \\ &= \mathcal{L}_n(\mu)_{c_1, \gamma_n}^{a_1, \alpha_1} \mathcal{L}_n(\lambda)_{c_2, \beta_n}^{a_2, \gamma_n} \mathcal{R}(\lambda - \mu)_{b_1 b_2}^{c_1 c_2} (-)^{([a_1] + [c_1])[a_2]}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Für das weitere Vorgehen seien die lokalen HILBERT-Räume \mathcal{H}_n isomorph zueinander. Ausgehend von den \mathcal{L}_n -Operatoren konstruiert man im nächsten Schritt die Monodromie-Matrix $\mathcal{T}_L(\lambda)$ eines homogenen L -Platz-Vertexmodells:

$$\mathcal{T}_L(\lambda) = \mathcal{L}_L(\lambda) \mathcal{L}_{L-1}(\lambda) \dots \mathcal{L}_2(\lambda) \mathcal{L}_1(\lambda), \quad (2.11)$$

in Komponenten:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_L(\lambda)_{b, \{\beta_1 \dots \beta_L\}}^{a, \{\alpha_1 \dots \alpha_L\}} &= \mathcal{L}_L(\lambda)_{c_L, \beta_L}^{a, \alpha_L} \mathcal{L}_{L-1}(\lambda)_{c_{L-1}, \beta_{L-1}}^{c_L, \alpha_{L-1}} \dots \mathcal{L}_2(\lambda)_{c_2, \beta_2}^{c_3, \alpha_2} \mathcal{L}_1(\lambda)_{b, \beta_1}^{c_2, \alpha_1} \\ &\times (-)^{\sum_{j=1}^L ([\alpha_j] + [\beta_j]) \sum_{i=1}^{j-1} [\alpha_i]}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

In diesem Zusammenhang bedeutet homogen, daß \mathcal{T}_L nur von einem einzigen Spektralparameter λ abhängt. Anhand von Gleichung (2.12) sieht man, daß $\mathcal{T}_L(\lambda)$ eine operatorwertige, $(m+n) \times (m+n)$ -dimensionale Matrix ist, die nicht-trivial auf dem globalen HILBERT-Raum \mathcal{H} wirkt, $\mathcal{T}_L(\lambda)_b^a \in \text{End}(\mathcal{H}_L) \otimes_S \dots \otimes_S \text{End}(\mathcal{H}_1)$. Mit Hilfe der lokalen YANG-BAXTER-Gleichung (2.9) und der Invertierbarkeit der \mathcal{R} -Matrix kann man leicht zeigen, daß auch die Monodromie-Matrix $\mathcal{T}_L(\lambda)$ einer sogenannten *Intertwining*-Relation bzw. gradierten, globalen YANG-BAXTER-Gleichung genügen muß [15]:

$$\mathcal{R}(\lambda - \mu) \left[\mathcal{T}_L(\lambda) \otimes_S \mathcal{T}_L(\mu) \right] = \left[\mathcal{T}_L(\mu) \otimes_S \mathcal{T}_L(\lambda) \right] \mathcal{R}(\lambda - \mu). \quad (2.13)$$

Bildet man bezüglich des Hilfsraumes $\mathcal{V}^{(m|n)}$ die Superspur der Monodromie-Matrix $\mathcal{T}_L(\lambda)$, so erhält man die sogenannte Transfermatrix $\hat{\tau}_L(\lambda)$:

$$\tau_L(\lambda)_{\beta_1 \dots \beta_L}^{\alpha_1 \dots \alpha_L} = \sum_{a=1}^{m+n} (-)^{[a]} \mathcal{T}_L(\lambda)_a^{a, \{\alpha_1 \dots \alpha_L\}} \in \text{End}(\mathcal{H}_L) \otimes_S \dots \otimes_S \text{End}(\mathcal{H}_1). \quad (2.14)$$

Eine unmittelbare Konsequenz der globalen YANG-BAXTER-Gleichung (2.13) ist, daß zwei Transfermatrizen mit beliebigen Spektralparametern miteinander kommutieren:

$$[\hat{\tau}_L(\lambda), \hat{\tau}_L(\mu)] = 0, \quad (2.15)$$

insbesondere gilt für jede analytische Funktion f :

$$[f(\hat{\tau}_L(\lambda)), \hat{\tau}_L(\mu)] = 0. \quad (2.16)$$

Im folgenden soll nun eine bestimmte Klasse von Lösungen der graduierten YANG-BAXTER-Gleichung (2.9) näher untersucht werden. Ausgehend von der *Intertwining-Relation* (2.13) kann man wegen $\Pi_{13} = \Pi_{12} \Pi_{23} \Pi_{12} = \Pi_{23} \Pi_{12} \Pi_{23}$ mit $\mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_2 \times \mathcal{V}_3 \xrightarrow{\Pi_{13}} \mathcal{V}_3 \times \mathcal{V}_2 \times \mathcal{V}_1$, $\mathcal{R}_{\lambda\mu} = \mathcal{R}(\lambda - \mu)$, d.h.

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_L^{\lambda\mu\nu} &= \mathcal{T}_L(\lambda) \otimes_S \mathcal{T}_L(\mu) \otimes_S \mathcal{T}_L(\nu) \\ &= [\mathcal{R}_{\lambda\mu}^{-1} \otimes_S I] [\mathcal{R}_{\lambda\mu} \otimes_S I] \mathcal{T}_L^{\lambda\mu\nu} \\ &= [\mathcal{R}_{\lambda\mu}^{-1} \otimes_S I] \mathcal{T}_L^{\mu\lambda\nu} [\mathcal{R}_{\lambda\mu} \otimes_S I] \\ &= [\mathcal{R}_{\lambda\mu}^{-1} \otimes_S I] [I \otimes_S \mathcal{R}_{\lambda\nu}^{-1}] [\mathcal{R}_{\mu\nu}^{-1} \otimes_S I] \mathcal{T}_L^{\nu\mu\lambda} [\mathcal{R}_{\mu\nu} \otimes_S I] [I \otimes_S \mathcal{R}_{\lambda\nu}] [\mathcal{R}_{\lambda\mu} \otimes_S I] \\ &= [I \otimes_S \mathcal{R}_{\mu\nu}^{-1}] [\mathcal{R}_{\lambda\nu}^{-1} \otimes_S I] [I \otimes_S \mathcal{R}_{\lambda\mu}^{-1}] \mathcal{T}_L^{\nu\mu\lambda} [I \otimes_S \mathcal{R}_{\lambda\mu}] [\mathcal{R}_{\lambda\nu} \otimes_S I] [I \otimes_S \mathcal{R}_{\mu\nu}], \end{aligned} \quad (2.17)$$

zeigen, daß \mathcal{R} der folgende Konsistenzgleichung, auch Quanten-YANG-BAXTER-Gleichung genannt, genügen muß [38]:

$$[I \otimes_S \mathcal{R}_{\lambda\mu}] [\mathcal{R}_{\lambda\nu} \otimes_S I] [I \otimes_S \mathcal{R}_{\mu\nu}] = [\mathcal{R}_{\mu\nu} \otimes_S I] [I \otimes_S \mathcal{R}_{\lambda\nu}] [\mathcal{R}_{\lambda\mu} \otimes_S I]. \quad (2.18)$$

Da die \mathcal{R} -Matrix homogen vom Grad Null ist, treten trotz der Graduierung von $\mathcal{V}^{(m|n)} \times \mathcal{V}^{(m|n)}$ keinerlei Minuszeichen auf, wenn man (2.18) in Komponenten ausschreibt:

$$\begin{aligned} &\mathcal{R}(\lambda - \mu)_{c_2 c_3}^{a_2 a_3} \mathcal{R}(\lambda - \nu)_{b_1 d_2}^{a_1 c_2} \mathcal{R}(\mu - \nu)_{b_2 b_3}^{d_2 c_3} \\ &= \mathcal{R}(\mu - \nu)_{c_1 c_2}^{a_1 a_2} \mathcal{R}(\lambda - \nu)_{d_2 b_3}^{c_2 a_3} \mathcal{R}(\lambda - \mu)_{b_1 b_2}^{c_1 d_2}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Die besondere Bedeutung von (2.18) besteht darin, daß man für jede Lösung \mathcal{R} mittels $\mathcal{L} = \Pi \mathcal{R}$ ein $(\mathcal{R}, \mathcal{L})$ -Paar konstruieren kann, das die lokale YANG-BAXTER-Gleichung (2.9) erfüllt. In diesem speziellen Fall sind der lokale HILBERT-Raum \mathcal{H}_n und der Hilfsraum $\mathcal{V}^{(m|n)}$ isomorph zueinander. Wie man leicht nachprüfen kann, löst die folgende \mathcal{R} -Matrix Gleichung (2.18):

$$\mathcal{R}(\lambda) = b(\lambda)I + a(\lambda)\Pi, \text{ mit } a(\lambda) = \frac{\lambda}{\lambda + i} \text{ und } b(\lambda) = \frac{i}{\lambda + i}. \quad (2.20)$$

Der dazugehörige \mathcal{L} -Operator ist dann gegeben durch

$$\mathcal{L}(\lambda) = a(\lambda)I + b(\lambda)\Pi, \quad (2.21)$$

wobei wie üblich I der Einheits- und Π der graduierte Permutationsoperator auf $\mathcal{V}^{(m|n)} \times \mathcal{V}^{(m|n)}$ ist. Da der \mathcal{L} -Operator (2.21) für $\lambda = 0$ einen sogenannten *Shift-Punkt* besitzt, d.h. $\mathcal{L}(0) = \Pi$, erhält man durch logarithmisches Differenzieren der korrespondierenden Transfermatrix $\hat{\tau}_L$ an diesem Punkt den HAMILTON-Operator des Modells, der ausschließlich Nächste-Nachbar-Wechselwirkungsterme enthält:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\partial}{\partial \lambda} \ln(\hat{\tau}_L(\lambda)) \Big|_{\lambda=0} = \sum_{i=1}^L \hat{\mathcal{H}}_{i,i+1}. \quad (2.22)$$

2.2.1 $gl(2|1)$ -invariante Lösungen der Yang-Baxter-Gleichung

Ziel dieses Abschnitt ist es, eine Klasse von $gl(2|1)$ -invarianten Lösungen der YANG-BAXTER-Gleichung (2.9) zu finden. Ausgangspunkt ist die SUTHERLANDSche Lösung des supersymmetrischen t - J -Modells, die zu der BFF-Graduierung korrespondiert[29, 38]: Der lokale HILBERT-Raum \mathcal{H}_n ist isomorph zu \mathbb{C}^3 und wird durch die drei Vektoren $e_1 = |0\rangle$, $e_2 = |\downarrow\rangle$ sowie $e_3 = |\uparrow\rangle$ aufgespannt, wobei $[1] = 0$ und $[2] = [3] = 1$. Diese Graduierung impliziert, daß sich die durch (2.20) gegebene \mathcal{R} -Matrix des Modells als:

$$\mathcal{R}_{[\frac{1}{2}]_+; [\frac{1}{2}]_+} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b-a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b-a \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

und der dazugehörige \mathcal{L} -Operator (2.21) als:

$$\mathcal{L}_{[\frac{1}{2}]_+}(\lambda) = \begin{pmatrix} a(\lambda) + b(\lambda) e_1^1 & b(\lambda) e_2^1 & b(\lambda) e_3^1 \\ b(\lambda) e_1^2 & a(\lambda) - b(\lambda) e_2^2 & -b(\lambda) e_3^2 \\ b(\lambda) e_1^3 & -b(\lambda) e_2^3 & a(\lambda) - b(\lambda) e_3^3 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

darstellen läßt. Es gibt noch zwei weitere, äquivalente Lösungen des supersymmetrischen t - J -Modells, die auf C. K. LAI und P. SCHLOTTMANN sowie auf F. H. L. Eßler und V. E. KOREPIN zurückgehen und zu einer alternativen Graduierung korrespondieren, nämlich der FFB- bzw. FBF-Graduierung [28, 38, 68].

Verwendet man die in Anhang A aufgeführten $[\frac{1}{2}]_+$ -Matrixdarstellung der $gl(2|1)$ -

Generatoren, so kann man den $\mathcal{L}_{[\frac{1}{2}]_+}$ -Operator (2.24) auch wie folgt schreiben:

$$\mathcal{L}_{[\frac{1}{2}]_+}(\lambda + i) = \frac{1}{\lambda + 2i} \begin{pmatrix} \lambda + 2i\hat{B}_{[\frac{1}{2}]_+} & i\sqrt{2}\hat{W}_{[\frac{1}{2}]_+}^- & i\sqrt{2}\hat{W}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ \\ i\sqrt{2}\hat{V}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ & \lambda + i(\hat{B}_{[\frac{1}{2}]_+} + \hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^z) & -i\hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ \\ -i\sqrt{2}\hat{V}_{[\frac{1}{2}]_+}^- & -i\hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^- & \lambda + i(\hat{B}_{[\frac{1}{2}]_+} - \hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^z) \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Desweiteren läßt sich zeigen, daß der aus (2.25) abgeleitete \mathcal{L} -Operator mit der \mathcal{R} -Matrix (2.23) die lokale YANG-BAXTER-Gleichung (2.9) erfüllt, solange man nur eine irreduzible Darstellung für die $gl(2|1)$ -Generatoren verwendet [45]:

$$\mathcal{L}(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda + 2i\hat{B} & i\sqrt{2}\hat{W}^- & i\sqrt{2}\hat{W}^+ \\ i\sqrt{2}\hat{V}^+ & \lambda + i(\hat{B} + \hat{S}^z) & -i\hat{S}^+ \\ -i\sqrt{2}\hat{V}^- & -i\hat{S}^- & \lambda + i(\hat{B} - \hat{S}^z) \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Die $gl(2|1)$ -Invarianz folgt aus der Tatsache, daß sich der \mathcal{L} -Operator (2.26) auch als ein Supertensorprodukt des CASIMIR-Operators K_2 schreiben läßt, vgl. Anhang A [61, 62]:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\lambda) = \lambda I & - i[2\hat{B}_{[\frac{1}{2}]_+} \otimes_S \hat{B} - 2\hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^z \otimes_S \hat{S}^z - \hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ \otimes_S \hat{S}^- - \hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^- \otimes_S \hat{S}^+ \\ & + 2\hat{W}_{[\frac{1}{2}]_+}^- \otimes_S \hat{V}^+ - 2\hat{W}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ \otimes_S \hat{V}^- + 2\hat{V}_{[\frac{1}{2}]_+}^- \otimes_S \hat{W}^+ - 2\hat{V}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ \otimes_S \hat{W}^-]. \end{aligned} \quad (2.27)$$

2.3 Algebraischer Bethe-Ansatz

Beschränkt man sich auf die *atypischen* $(4S + 1)$ -dimensionalen $[S]_+$ -Darstellungen der $gl(2|1)$ -Generatoren im Quantenraum, so läßt sich ausgehend von dem \mathcal{L} -Operator (2.26) eine integrable Familie von generalisierten supersymmetrischen t - J -Modellen ableiten. Es handelt sich dabei um Spin S -Ketten, die mit frei beweglichen Spin $(S - 1/2)$ Störstellen dotiert sind und die man in analoger Weise wie das supersymmetrische t - J -Modelle lösen kann: Das Spektrum der Transfermatrix $\hat{\tau}_L$ sowie die diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen werden mit Hilfe eines iterativen, algebraischen BETHE-Ansatzes hergeleitet [28, 29, 38, 63].

Für die Konstruktion des sogenannten *Nested*-BETHE-Ansatzes benötigt man ausschließlich die Existenz eines Pseudovakuums $|\Omega\rangle$ und die *Intertwining*-Relation (2.13). Die Monodromie-Matrix \mathcal{T}_L (2.12) läßt sich als eine (3×3) -Matrix im Hilfsraum darstellen, deren Einträge Operatoren sind, die auf dem globalen HILBERT-Raum \mathcal{H} wirken:

$$\mathcal{T}_L(\lambda) = \begin{pmatrix} \hat{A}_{11}(\lambda) & \hat{A}_{12}(\lambda) & \hat{B}_1(\lambda) \\ \hat{A}_{21}(\lambda) & \hat{A}_{22}(\lambda) & \hat{B}_2(\lambda) \\ \hat{C}_1(\lambda) & \hat{C}_2(\lambda) & \hat{D}(\lambda) \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

Aufgrund der globalen YANG-BAXTER-Gleichung (2.13) und der speziellen Form der \mathcal{R} -Matrix (2.23) erhält man die folgenden verallgemeinerte Kommutatorrelationen für die Komponenten von \mathcal{T}_L :

$$\begin{aligned} b(\lambda_{12})\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_1)_{b_1}^{a_1}\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_2)_{b_2}^{a_2} + (-)^{[a_1][a_2]+[a_1][b_1]+[a_2][b_1]} a(\lambda_{12})\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_1)_{b_1}^{a_2}\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_2)_{b_2}^{a_1} = \\ b(\lambda_{12})\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_2)_{b_1}^{a_1}\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_1)_{b_2}^{a_2} + (-)^{[b_1][b_2]+[b_1][a_2]+[b_2][a_2]} a(\lambda_{12})\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_2)_{b_2}^{a_1}\hat{\mathcal{T}}_L(\lambda_1)_{b_1}^{a_2}. \end{aligned}$$

Allerdings benötigt man für die weiteren Rechnungen ausschließlich:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{ab}(\lambda_1)\hat{C}_c(\lambda_2) &= (-)^{[a][l]+[a]+[b]} \frac{r_{BF}(\lambda_{12})_{lb}^{kc}}{a(\lambda_{12})} \hat{C}_l(\lambda_2)\hat{A}_{ak}(\lambda_1) + \\ &\quad (-)^{([a]+1)([b]+1)} \frac{b(\lambda_{12})}{a(\lambda_{12})} \hat{C}_b(\lambda_1)\hat{A}_{ac}(\lambda_2), \\ \hat{D}(\lambda_1)\hat{C}_a(\lambda_2) &= \frac{1}{a(\lambda_{12})} \hat{C}_a(\lambda_2)\hat{D}(\lambda_1) + \frac{b(\lambda_{21})}{a(\lambda_{21})} \hat{C}_a(\lambda_1)\hat{D}(\lambda_2), \\ \hat{C}_a(\lambda_1)\hat{C}_b(\lambda_2) &= r_{FB}(\lambda_{21})_{ab}^{kl} \hat{C}_k(\lambda_2)\hat{C}_l(\lambda_1). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Die beiden (4×4) -dimensionalen \mathcal{R} -Matrizen r_{BF} und r_{FB} sind gegeben durch

$$r_{BF}(\lambda) = b(\lambda)I + a(\lambda)\Pi_{BF} \quad \text{und} \quad r_{FB}(\lambda) = b(\lambda)I + a(\lambda)\Pi_{FB}, \quad (2.30)$$

wobei Π_{BF} bzw. Π_{FB} der zur Graduierung $[1] = 0$, $[2] = 1$ bzw. $[1] = 1$, $[2] = 0$ korrespondierende graduierte Permutationsoperator ist [38].

Wählt man den undotierten und vollständig polarisierten Zustand $|0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle$ mit $|0\rangle = |S, S, S\rangle$ als Pseudovakuum $|\Omega\rangle$, so sieht man auf Grund von

$$\mathcal{L}(\lambda)|0\rangle = \begin{pmatrix} \lambda + 2iS & 0 & 0 \\ 0 & \lambda + 2iS & 0 \\ -i\sqrt{2}\hat{V}^- & -i\hat{S}^- & \lambda \end{pmatrix} |0\rangle, \quad (2.31)$$

daß die Monodromie-Matrix \mathcal{T}_L (2.28) auf den Referenz-Zustand $|\Omega\rangle$ wie folgt wirkt:

$$\mathcal{T}_L(\lambda)|\Omega\rangle = \begin{pmatrix} (\lambda + 2iS)^L & 0 & 0 \\ 0 & (\lambda + 2iS)^L & 0 \\ \hat{C}_1(\lambda) & \hat{C}_2(\lambda) & \lambda^L \end{pmatrix} |\Omega\rangle. \quad (2.32)$$

Das bedeutet, das Pseudovakuum $|\Omega\rangle$ ist ein Eigenzustand zum Eigenwert $(-\lambda)^L$ der Transfermatrix $\hat{\tau}_L$:

$$\hat{\tau}_L(\lambda) = \hat{A}_{11}(\lambda) - \hat{A}_{22}(\lambda) - \hat{D}(\lambda). \quad (2.33)$$

Der Operator \hat{C}_1 angewandt auf $|\Omega\rangle$ erzeugt eine Störstelle, während \hat{C}_2 einen Spinflip bewirkt. Für die weiteren Eigenzustände der Transfermatrix $\hat{\tau}_L$, die durch die Anzahl der

Störstellen N_h und die Magnetisierung $M^z = LS - \frac{1}{2}N_h - N_\downarrow$ charakterisiert werden, verwendet man den Ansatz

$$|\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_n|F\rangle = \hat{C}_{a_1}(\tilde{\lambda}_1) \dots \hat{C}_{a_n}(\tilde{\lambda}_n)|\Omega\rangle F^{a_n \dots a_1}, \quad (2.34)$$

mit $a_i = 1, 2$ und $n = N_h + N_\downarrow$. Die Amplituden $F^{a_n \dots a_1}$ sind zunächst einmal unbestimmte Funktionen in den Spektralparametern $\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_n$. Mittels der generalisierten Kommutatorrelationen (2.29) kann man nun berechnen, wie die Diagonalelemente von \mathcal{T}_L auf einen solchen Zustand (2.34) operieren. Man findet [38]:

$$\begin{aligned} \hat{D}(\mu)|\tilde{\lambda}_1 \dots \tilde{\lambda}_n|F\rangle &= \underbrace{\prod_{j=1}^n \frac{1}{a(\mu - \tilde{\lambda}_j)} (-\mu)^L |\tilde{\lambda}_1 \dots \tilde{\lambda}_n|F\rangle}_{\text{erwünschter Term = diagonal}} \\ &+ \underbrace{\sum_{k=1}^n (\tilde{\Lambda}_k)_{a_1 \dots a_n}^{b_1 \dots b_n} \hat{C}_{b_k}(\mu) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \hat{C}_{b_j}(\tilde{\lambda}_j) |0\rangle F^{a_n \dots a_1}}_{\text{unerwünschter Term = nicht diagonal}}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

und:

$$\begin{aligned} [\hat{A}_{11}(\mu) - \hat{A}_{22}(\mu)]|\tilde{\lambda}_1 \dots \tilde{\lambda}_n|F\rangle &= \underbrace{(\mu + 2iS)^L \prod_{j=1}^n \frac{1}{a(\mu - \tilde{\lambda}_j)} \prod_{l=1}^n \hat{C}_{b_l}(\tilde{\lambda}_l) |0\rangle \tau_n^{(1)}(\mu)_{a_1 \dots a_n}^{b_1 \dots b_n} F^{a_n \dots a_1}}_{\text{erwünschter Term = diagonal}} \\ &+ \underbrace{\sum_{k=1}^n (\Lambda_k)_{a_1 \dots a_n}^{b_1 \dots b_n} \hat{C}_{b_k}(\mu) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \hat{C}_{b_j}(\tilde{\lambda}_j) |0\rangle F^{a_n \dots a_1}}_{\text{unerwünschter Term = nicht diagonal}}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Anhand dieser beiden Gleichungen sieht man, daß der BETHE-Ansatz-Zustand (2.34) ein Eigenvektor der Transfermatrix $\hat{\tau}_L$ (2.33) ist, wenn sich die unerwünschten Terme gegenseitig wegheben

$$[(\Lambda_k)_{a_1 \dots a_n}^{b_1 \dots b_n} - (\tilde{\Lambda}_k)_{a_1 \dots a_n}^{b_1 \dots b_n}] F^{a_n \dots a_1} = 0, \quad (2.37)$$

und die unbekannten Amplituden $F^{a_n \dots a_1}$, die man als Komponenten eines Vektors F aus dem Zustandsraum des Modells auffassen kann, den folgenden Gleichungen genügen:

$$F^{a_n \dots a_1} = - \left(\frac{-\tilde{\lambda}_k}{\tilde{\lambda}_k + 2iS} \right)^L [\hat{\tau}_n^{(1)}(\tilde{\lambda}_k) F]^{a_n \dots a_1}, \quad k = 1, \dots, n. \quad (2.38)$$

Man kann zeigen, daß sich ausgehend von dem $(\mathcal{R}^{(1)}, \mathcal{L}^{(1)})$ -Paar

$$\mathcal{R}^{(1)}(\lambda)_{b_1 b_2}^{a_1 a_2} = b(\lambda) \delta_{b_1}^{a_1} \delta_{b_2}^{a_2} + (-)^{[a_1] + [a_2] + [a_1][a_2]} a(\lambda) \delta_{b_2}^{a_1} \delta_{b_1}^{a_2}, \quad (2.39)$$

$$\mathcal{L}^{(1)}(\lambda) = b(\lambda) \Pi_{BF} + a(\lambda) I, \quad (2.40)$$

das der folgenden gradierte YANG-Baxter-Gleichung genügt

$$\mathcal{R}^{(1)}(\lambda - \mu) \left[\mathcal{L}^{(1)}(\lambda) \otimes^s \mathcal{L}^{(1)}(\mu) \right] = \left[\mathcal{L}^{(1)}(\mu) \otimes^s \mathcal{L}^{(1)}(\lambda) \right] \mathcal{R}^{(1)}(\lambda - \mu) \quad (2.41)$$

mit $(A \otimes^s B)_{b_1 b_2}^{a_1 a_2} = A_{b_1}^{a_1} B_{b_2}^{a_2} (-)^{([a_1] + [b_1])([a_2] + 1)}$, eine (4×4) -dimensionale Monodromie-Matrix $\mathcal{T}_n^{(1)}(\lambda) = \mathcal{L}_n^{(n)}(\lambda - \tilde{\lambda}_1) \otimes^s \dots \otimes^s \mathcal{L}_1^{(1)}(\lambda - \tilde{\lambda}_1)$ eines inhomogenen n -Platz-Vertexmodells konstruiert läßt [38]. Wegen der Invertierbarkeit von $\mathcal{R}^{(1)}$ erfüllt $\mathcal{T}_n^{(1)}$ eine globale YANG-BAXTER-Gleichung

$$\mathcal{R}^{(1)}(\lambda - \mu) \left[\mathcal{T}_n^{(1)}(\lambda) \otimes^S \mathcal{T}_n^{(1)}(\mu) \right] = \left[\mathcal{T}_n^{(1)}(\mu) \otimes^S \mathcal{T}_n^{(1)}(\lambda) \right] \mathcal{R}^{(1)}(\lambda - \mu) \quad (2.42)$$

und die zugehörige Transfermatrix ist gerade $\hat{\tau}_n^{(1)}$. Wählt man den Zustand $|\bar{0}\rangle \otimes \dots \otimes |\bar{0}\rangle$ mit $|\bar{0}\rangle = (0, 1)^T$ als neues Pseudovakuum $|\bar{\Omega}\rangle$, so kann $\hat{\tau}_n^{(1)}$ mit Hilfe eines zweiten (Nested) algebraischen BETHE-Ansatzes diagonalisiert werden. Die Amplituden $F^{a_n \dots a_1}$ entsprechen gerade den Komponenten der Eigenvektoren von $\hat{\tau}_n^{(1)}$, die durch einen zweiten Satz von Spektralparametern $\{\tilde{\nu}_\alpha\}_{\alpha=1}^{N_h}$, den sogenannten Störstellen-Rapiditäten, charakterisiert werden.

Ein Zustand $|\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_n|F\rangle$ (2.34) ist somit nur genau dann ein Eigenvektor der Transfermatrix $\hat{\tau}_L(\mu)$ (2.33) zum Eigenwert Λ

$$\begin{aligned} \Lambda \left(\mu \left| \{\tilde{\lambda}_j\}_{j=1}^{N_\downarrow + N_h}; \{\tilde{\nu}_\alpha\}_{\alpha=1}^{N_h} \right. \right) &= -\mu^L \prod_{j=1}^{N_h + N_\downarrow} \frac{\mu - \tilde{\lambda}_j + i}{\mu - \tilde{\lambda}_j} \\ &+ (\mu + 2iS)^L \prod_{\alpha=1}^{N_h} \frac{\mu - \tilde{\nu}_\alpha + i}{\mu - \tilde{\nu}_\alpha} \left\{ 1 - \prod_{j=1}^{N_h + N_\downarrow} \frac{\tilde{\lambda}_j - \mu + i}{\tilde{\lambda}_j - \mu} \right\}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

wenn die Spektralparameter $\tilde{\lambda}_j \equiv \lambda_j - iS$ und $\tilde{\nu}_\alpha \equiv \nu_\alpha - iS + i/2$ den sogenannten BETHE-Ansatz-Gleichungen genügen [45]:

$$\left(\frac{\lambda_j + iS}{\lambda_j - iS} \right)^L = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{N_h + N_\downarrow} \frac{\lambda_j - \lambda_k + i}{\lambda_j - \lambda_k - i} \prod_{\alpha=1}^{N_h} \frac{\lambda_j - \nu_\alpha - i/2}{\lambda_j - \nu_\alpha + i/2} \quad j = 1, \dots, N_h + N_\downarrow \quad (2.44)$$

$$1 = \prod_{k=1}^{N_h + N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha - \lambda_k + i/2}{\nu_\alpha - \lambda_k - i/2}, \quad \alpha = 1, \dots, N_h. \quad (2.45)$$

Setzt man $S = 1/2$, d.h. $[S]_+ = [\frac{1}{2}]_+$, so erhält man die SUTHERLANDSche Form der BETHE-Ansatz-Gleichungen für das supersymmetrische t -J-Modell [29]. Der Fall $S = 1$ korrespondiert zu der dotierten Spin $S = 1$ -Kette [69, 45], deren thermodynamische Eigenschaften in den nachfolgenden Kapitel untersucht werden sollen.

2.4 Hamilton-Operator der dotierten Spin $S=1$ -Kette

Abschließend soll der HAMILTON-Operator der dotierten Spin $S=1$ -Kette mit Hilfe der sogenannten Fusionsmethode konstruiert werden [43, 44]. Für die fundamentale dreidimensionale Darstellung $[\frac{1}{2}]_+$ der $gl(2|1)$ -Superalgebra besitzt der dazugehörige \mathcal{L} -Operator (2.26) bei $\lambda = -i$ einen *Shift*-Punkt. Gemäß (2.22) läßt sich der HAMILTON-Operator des supersymmetrischen t - J -Modells herleiten [38]:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{t-J} = & -\mathcal{P} \left(\sum_{n=1}^L \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + c_{n+1,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} \right) \mathcal{P} \\ & + 2 \sum_{n=1}^L \left\{ \hat{S}_n \hat{S}_{n+1} - \frac{\hat{n}_n \hat{n}_{n+1}}{4} + \frac{1}{2} (\hat{n}_n + \hat{n}_{n+1}) \right\}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

wobei \mathcal{P} der Projektor auf den Unterraum $\{|0\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ ist. Für die übrigen *atypischen* Darstellungen $[S]_+$ funktioniert dieses Verfahren jedoch nicht mehr, da wegen der unterschiedlichen Dimensionalität von Hilfs- und Quantenraum der \mathcal{L} -Operator (2.26) keinen *Shift*-Punkt besitzt. Um neue homogene Gittermodelle zu erhalten, muß man daher $gl(2|1)$ -invariante \mathcal{L} -Operatoren finden, die auf einem Tensorprodukt von Hilfs- und Quantenraum derselben Dimension, nämlich $(4S+1)$, wirken. Die Eigenwerte $\Lambda_{[1]_+}$ der Transfermatrix $\hat{\tau}_{L,[1]_+}$ mit der fünfdimensionalen $[1]_+$ -Darstellung im Hilfsraum können mittels der Fusionsmethode aus den im vorherigen Abschnitt hergeleiteten Eigenwerten Λ (2.43) bestimmt werden [45].

Die allgemeine Form eines $gl(2|1)$ -invarianten $\mathcal{L}^{S,S'}$ -Operators, der auf zwei Räume mit $[S]_+$ - und $[S']_+$ -Darstellung wirkt, ist gegeben durch [45]:

$$\mathcal{L}^{S,S'}(\lambda) = - \prod_{\substack{k= \\ |S-S'|+1}}^{S+S'} \frac{\lambda - ik}{\lambda + ik} \mathcal{P}_{[S+S']_+} - \sum_{\substack{m= \\ |S-S'|}}^{S+S'-1} \prod_{\substack{k= \\ |S-S'|+1}}^m \frac{\lambda - ik}{\lambda + ik} \mathcal{P}_{[S+S'+\frac{1}{2}; m+\frac{1}{2}]}. \quad (2.47)$$

Hierbei ist \mathcal{P}_Λ der Projektor auf das $gl(2|1)$ -invariante Multipllett Λ des Tensorproduktes $[S]_+ \otimes [S']_+$, vgl. Anhang A. Man erkennt, daß $\mathcal{L}^{S,S}(\lambda=0) = \Pi$. Zusammen mit $\mathcal{R}^{S,S'} = \Pi \mathcal{L}^{S,S'}$ erfüllt $\mathcal{L}^{S,S'}$ die folgende YANG-BAXTER-Gleichung:

$$\begin{aligned} & \mathcal{R}^{S_1,S_2}(\lambda - \mu) [\mathcal{L}^{S_1,S_3}(\lambda) \otimes_S \mathcal{L}^{S_2,S_3}(\mu)] \\ &= [\mathcal{L}^{S_2,S_3}(\mu) \otimes_S \mathcal{L}^{S_1,S_3}(\lambda)] \mathcal{R}^{S_1,S_2}(\lambda - \mu). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Die aus (2.47) konstruierte Transfermatrix $\hat{\tau}_L^{S,S'}(\lambda) = \text{str}_S \mathcal{L}_L^{S,S'}(\lambda) \dots \mathcal{L}_1^{S,S'}(\lambda)$ genügt daher für beliebige Darstellungen $[S_1]_+$, $[S_2]_+$ und $[S]_+$ sowie Spektralparameter λ und μ der Gleichung:

$$[\hat{\tau}_L^{S_1,S}(\lambda), \hat{\tau}_L^{S_2,S}(\mu)] = 0. \quad (2.49)$$

Wählt man in (2.47) $S=1/2$, dann besteht zwischen den \mathcal{L} -Operatoren in (2.26) und (2.47) folgender Zusammenhang:

$$\mathcal{L}^{1/2,S'}(\lambda) = -\frac{1}{\lambda + i(S'+1/2)} \mathcal{L}(\lambda - i(S'+1/2)). \quad (2.50)$$

Die Grundlage der Fusionsmethode bildet der zusammengesetzte oder fusionierte $\tilde{\mathcal{L}}^S$ -Operator

$$\tilde{\mathcal{L}}^S(\lambda) = \mathcal{L}^{1/2,S}(\lambda - i/2) \otimes_S \mathcal{L}^{1/2,S}(\lambda + i/2), \quad (2.51)$$

der auf einer vierdimensionalen $[3/2; 1/2]$ - und einer fünfdimensionalen $[1]_+$ - Darstellung im Hilfsraum operiert. Im allgemeinen werden die $[3/2; 1/2]$ - und die $[1]_+$ - Zustände durch die Matrix $\tilde{\mathcal{L}}^S$ gemischt, es sei denn, $\tilde{\mathcal{L}}^S$ erfüllt die folgende Dreiecksbedingung:

$$\mathcal{P}_{[1]_+} \tilde{\mathcal{L}}^S(\lambda) \mathcal{P}_{[3/2; 1/2]} = 0. \quad (2.52)$$

Setzt man in (2.48) $S_1 = S_2 = 1/2$ und $(\lambda - \mu) = -i$, d.h. $\mathcal{R}^{1/2, 1/2}(-i) \propto \mathcal{P}_{[1]_+}$, so läßt sich zeigen, daß die obige Gleichung wegen

$$\begin{aligned} & \mathcal{P}_{[1]_+} [\mathcal{L}^{1/2,S}(\lambda - i/2) \otimes_S \mathcal{L}^{1/2,S}(\lambda + i/2)] \\ &= [\mathcal{L}^{1/2,S}(\lambda - i/2) \otimes_S \mathcal{L}^{1/2,S}(\lambda + i/2)] \mathcal{P}_{[1]_+}, \end{aligned} \quad (2.53)$$

d.h. $\tilde{\mathcal{L}}^S(\lambda) = \mathcal{P}_{[1]_+} \tilde{\mathcal{L}}^S(\lambda) \mathcal{P}_{[1]_+}$, und $\mathcal{P}_{[1]_+} \mathcal{P}_{[3/2; 1/2]} = 0$ tatsächlich gilt. Nach einer geeigneten Umordnung der Basis läßt sich (2.51) somit schreiben als:

$$\tilde{\mathcal{L}}^S(\lambda) = \begin{pmatrix} \mathcal{L}^{[3/2; 1/2], S}(\lambda) & * \\ 0 & \mathcal{L}^{[1]_+, S}(\lambda) \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Die Monodromie-Matrix $\tilde{\mathcal{T}}_L^S$ genügt wieder einer YANG-BAXTER-Gleichung, aus der man mittels Super-Spurbildung über den Hilfsraum die Fusions-Relationen für die entsprechende Transfermatrizen ableiten kann:

$$\tilde{\tau}_L^S(\lambda) = \hat{\tau}_L^{1/2,S}(\lambda - i/2) \hat{\tau}_L^{1/2,S}(\lambda + i/2) = \hat{\tau}_L^{1,S}(\lambda) + \hat{\tau}_L^{[3/2; 1/2], S}(\lambda), \quad (2.55)$$

bzw. wegen deren Kommutativität entsprechend auch für die Eigenwerte:

$$\tilde{\Lambda}^S = \Lambda^{1/2,S}(\lambda - i/2) \Lambda^{1/2,S}(\lambda + i/2) = \Lambda^{1,S}(\lambda) + \Lambda^{[3/2; 1/2], S}(\lambda). \quad (2.56)$$

Benutzt man, daß die Eigenwerte der Transfermatrix analytische Funktionen in λ sind und $\hat{\tau}_L^{1,S}$ sowie $\hat{\tau}_L^{[3/2; 1/2], S}$ auf das Pseudovakuum $|\Omega\rangle$ trivial wirken, so läßt sich $\Lambda^{1,S}$ berechnen [44, 45]. Da der $\mathcal{L}^{1,1}$ -Operator bei $\lambda = 0$ identisch zum graduierten Permutationsoperator $\mathcal{P}_{[1]_+}$ ist, erhält man durch logarithmisches Ableiten von $\tilde{\tau}_L$ bei $\lambda = 0$ den lokalen HAMILTON-Operator der dotierten Spin $S=1$ -Kette [45, 69]:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{n=1}^L \left\{ \hat{\mathcal{H}}_{n, n+1}^{exch} + \hat{\mathcal{H}}_{n, n+1}^{hopp} \right\}. \quad (2.57)$$

Die Energieeigenwerte E werden ausgehend von $\Lambda^{1,1}$ bestimmt. Berücksichtigt man noch den Einfluß eines externen Magnetfeldes H sowie eines chemischen Störstellenpotentials μ , so ist E gegeben durch [45, 69]:

$$\begin{aligned} & E(\{\lambda_j\}_{j=1}^{N_h+N_\downarrow}; \{\nu_\alpha\}_{\alpha=1}^{N_h}) - H M^z - \mu N_h \\ &= \sum_{j=1}^{N_h+N_\downarrow} \left(H - \frac{2}{\lambda_j^2 + 1} \right) - \sum_{\alpha=1}^{N_h} \left(\mu + \frac{1}{2} H \right) - L H. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Die Spektralparameter λ_j und ν_α sind dabei wie gehabt Lösungen der diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen (2.44). Verwendet man Spin-Operatoren \hat{S}_i mit $\hat{S}_i^2 = S_i(S_i + 1)$, $S_i = 1/2$ oder 1, so läßt sich der antiferromagnetische Wechselwirkungsterm $\hat{\mathcal{H}}^{exch}$ und der kinetische Term $\hat{\mathcal{H}}^{hopp}$ wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{i,j}^{exch} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{S_i S_j} \hat{S}_i \hat{S}_j - 1 + \delta_{S_i S_j, 1} \left(1 - (\hat{S}_i \hat{S}_j)^2 \right) \right\}, \\ \hat{\mathcal{H}}_{i,j}^{hopp} &= -(1 - \delta_{S_i, S_j}) (\hat{S}_i \hat{S}_j) \mathcal{P}_{i,j} .\end{aligned}\quad (2.59)$$

$\mathcal{P}_{i,j}$ ist der Permutationsoperator, der den i -ten und j -ten Spin vertauscht. Anhand von (2.59) sieht man, daß der Wechselwirkungsterm der undotierten Kette, $S_i = S_j = 1$, identisch zu der integrablen Spin $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette ist, während $\hat{\mathcal{H}}$ im Falle vollständiger Dotierung $x_h = 1$, $S_i = S_j = 1/2$, dem isotropen Spin $S=1/2$ -HEISENBERG-Modell entspricht [39, 40, 41]. Zum kinetischen Term bleibt noch anzumerken, daß die Hüpfamplituden $t(S_{i,j})$ abhängig sind von dem Gesamtspin $S_{i,j}$ der beiden Plätze i und j , so ist für das Dublett $t(1/2) = -1$ und für das Quartett $t(3/2) = 1/2$.

Bezüglich der physikalischen Relevanz des mit Hilfe der gradierten Quanten-Inversen-Streumethode konstruierten HAMILTON-Operators (2.57) läßt sich folgendes sagen: $\hat{\mathcal{H}}$ ähnelt dem von K. HIDA in [49] vorgeschlagenem effektiven Ein-Band HAMILTON-Operator für dotierte HALDANE-Systeme wie z.B. für $\text{Y}_{2-x}\text{Ca}_x\text{BaNiO}_5$ oder $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ [49]:

$$\hat{\mathcal{H}}_H = \sum_{n=1}^L \left\{ \delta_{S_n S_{n+1}, 1} J \hat{S}_n \hat{S}_{n+1} - \mathcal{P}_{n,n+1} \left(\hat{S}_n \hat{S}_{n+1} + \frac{1}{2} \right) \right\}. \quad (2.60)$$

Mit diesem Modell lassen sich die Veränderungen der magnetischen Eigenschaften von antiferromagnetischen MOTT-Isolatoren untersuchen, die beim Hinzufügen von frei beweglichen Störstellen durch Frustrationseffekte verursacht werden [70, 71, 72, 73, 74].

Allerdings gibt es auch einige Differenzen zwischen den beiden HAMILTON-Operatoren $\hat{\mathcal{H}}$ (2.59) und $\hat{\mathcal{H}}_H$ (2.60). So ist wegen der $gl(2|1)$ -Invarianz von $\hat{\mathcal{H}}$ das Verhältnis von antiferromagnetischer Austauschwechselwirkung J und den Hüpfamplituden $t(S_{i,j})$ in (2.59) fixiert. Auch unterscheiden sich die Hüpfamplituden der beiden Modelle voneinander, $t_H(1/2) = -1/2$ und $t_H(3/2) = 1$ im Gegensatz zu $t(1/2) = -1$ und $t(3/2) = 1/2$. Zwei weitere Unterschiede findet man beim Vergleich der beiden Wechselwirkungsterme: Für $x_h = 0$ ist $\hat{\mathcal{H}}_H$ identisch zu dem Spin $S=1$ -HEISENBERG-Modell, das eine endliche Anregungslücke aufweist, während $\hat{\mathcal{H}}$ durch die Spin $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette beschrieben wird, dessen Tieftemperaturanregungen masselos sind. Ferner sind die Spin $S=1/2$ -Störstellen im Falle von (2.60) unmagnetisch, d.h. es existieren keine antiferromagnetische Nächste-Nachbar-Kopplungen.

KAPITEL 3

Statische Tieftemperatureigenschaften des integrablen Modells

In diesem Kapitel sollen die Tieftemperatureigenschaften einer integrablen, antiferromagnetischen Spin $S = 1$ -Kette, die mit frei beweglichen Spin $S = 1/2$ -Störstellen dotiert ist, in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h und einem äußeren Magnetfeld H untersucht werden. Ausgangspunkt dafür sind die im vorangegangenen Kapitel mittels der Quanten-Inversen-Streumethode und des algebraischen BETHE-Ansatzes hergeleiteten diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen für die Störstellen- und Spinrapiditäten ν_α bzw. λ_j , durch die die physikalischen Eigenschaften wie z.B. die Energie- und Impulseigenwerte $E(\{\nu, \lambda\})$ und $P(\{\nu, \lambda\})$ dieses verallgemeinerten supersymmetrischen t - J -Modells eindeutig bestimmt sind.

Im ersten Teil wird die von M. TAKAHASHI sowie C. N. und C. P. YANG entwickelte Methode des thermodynamischen BETHE-Ansatzes auf das Modell angewendet [27, 46]. Damit lassen sich im thermodynamischen Limes (Systemgröße $L \rightarrow \infty$) die BETHE-Ansatz-Gleichungen sowie die benötigten physikalischen Größen systematisch und kontrolliert herleiten. Als Grundlage dient die von M. TAKAHASHI formulierte *String*-Hypothese, gemäß der im thermodynamischen Limes die Struktur aller BETHE-Ansatz-Lösungen bekannt ist [69, 45]: Für das hier betrachtete Modell bestehen die allgemeinen Lösungen nur aus reellwertigen Störstellenrapiditäten und komplexwertigen n -*Strings* für die Spinrapiditäten. Allerdings ist auch bekannt, daß die *String*-Hypothese nicht uneingeschränkt gilt, d.h. es gibt Modelle, die für $L \rightarrow \infty$ Lösungen anderer Struktur besitzen. In diesen Fällen ist die Anzahl N dieser Lösungen jedoch endlich oder allenfalls gilt $\lim_{L \rightarrow \infty} N/L = 0$. Daher geht man davon aus, daß solche Lösungen nicht zum thermodynamischen Verhalten des Systems beitragen. Somit läßt sich basierend auf TAKAHASHIS *String*-Hypothese im thermodynamischen Limes ein System von linearen, gekoppelten Integralgleichungen für die Störstellen- und n -*String*-Dichten ρ und σ_n ableiten.

Bei den bisherigen Überlegungen ging man davon aus, daß die korrekte Behandlung der gewünschten thermodynamischen Eigenschaften der dotierten Spin $S = 1$ -Kette im Rahmen der mikrokanonischen Gesamtheit mit ihren natürlichen Variablen wie der (inneren) Energie E , der Systemlänge L und der Anzahl der Störstellen N_h und der Spinflips N_\downarrow erfolgt, d.h. daß man ein isoliertes bzw. quasi-isoliertes System betrachtet. Ziel dieses Kapitels sind die Tieftemperatureigenschaften dieses Modells zu analysieren — also die experimentell relevantere Situation, daß sich das System bei gegebener Systemgröße L sowie fester Störstellenkonzentration x_h im thermischen Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T befindet. Formal bedeutet dies, daß das Modell im Rahmen einer kanonischen und nicht mehr einer mikrokanonischen Gesamtheit beschrieben werden muß. Mathematisch erreicht man diesen Betrachtungswechsel, indem man die Energie E bzgl. der Entropie S

LEGENDRE-transformiert. Als neues thermodynamisches Potential des Systems erhält man die freie Energie $F = E - TS$, wobei die Entropie S , wie von C. N. und C. P. YANG vorgeschlagen, kombinatorisch zu bestimmen ist [46]. Aus der Forderung, daß die freie Energie F im thermodynamischen Gleichgewicht minimal ist, lassen sich die Gleichgewichtsverteilungen für die Dichten ρ und σ_n berechnen. Als Ergebnis dieser Minimierungsprozedur von F ergeben sich zwei äquivalente, nichtlineare, gekoppelte Integralgleichungssystem für die sogenannten *Dressed-Energies* κ und ϵ_n , die man auch als thermodynamische BETHE-Ansatz-Gleichungen bezeichnet. Physikalisch lassen sich die *Dressed-Energies* als Quasiteilchenbänder interpretieren, die mit den entsprechenden Störstellen bzw. *n-Strings* zusammenhängen. Ferner erkennt man, daß für beliebige Störstellenkonzentration x_h und äußere Magnetfelder H nur maximal die drei Anregungsmoden κ , ϵ_1 und ϵ_2 masselos werden können [45, 69].

Im zweiten Abschnitt sollen die Tieftemperatureigenschaften der dotierten Spin $S = 1$ -Kette untersucht werden. Da die massiven Anregungsmoden im Grenzfall tiefer Temperaturen $T \rightarrow 0$ wegen ihrer endlichen Anregungslücke nicht zum thermodynamischen Verhalten des Systems beitragen, ist es ausreichend für $T = 0$ das Verhalten der masselosen Moden zu analysieren. Das reduzierte Gleichungssystem der dotierten Spin $S = 1$ -Kette, das als Ausgangspunkt für die weiteren Untersuchungen dient, besteht demnach aus maximal drei linearen, gekoppelten Integralgleichungen. Zunächst wird das Phasendiagramm des Modells bei $T = 0$ in der μ - H - bzw. x_h - H -Ebene bestimmt. Die unterschiedlichen Phasen werden dabei nach der Anzahl der tatsächlich auftretenden masselosen Anregungen sowie deren physikalischen Eigenschaften, z. B. ob es sich um *Spinonen* oder *Holonen* handelt, klassifiziert. Um die Phasengrenzen zu bestimmen, muß man das oben erwähnte reduzierte Gleichungssystem für die drei Moden κ , ϵ_1 und ϵ_2 in Abhängigkeit von $\{\mu, H\}$ oder $\{x_h, H\}$ lösen. Dies ist im allgemeinen jedoch nur numerisch möglich. Für kleine Störstellenkonzentration x_h lassen sich allerdings teilweise die Phasengrenzen mit Hilfe einer TAYLOR-Entwicklung näherungsweise analytisch bestimmen.

Im Rahmen des thermodynamischen BETHE-Ansatzes können nur statische thermodynamische Größen wie etwa die freie Energie F sowie die zu den Zustandsgrößen (konjugierten) Variablen und Suszeptibilitäten berechnet werden, nicht jedoch dynamische Größen wie etwa Korrelationsfunktionen. Dies ist deswegen nicht möglich, da die BETHE-Ansatz-Zustände nicht explizit konstruiert werden können. Im dritten Abschnitt dieses Kapitel werden daher ausschließlich weitere statische Eigenschaften des Grundzustandes sowie des Anregungsspektrums untersucht. Von besonderem Interesse ist dabei die Systemmagnetisierung m^z und deren Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld H sowie von der Störstellenkonzentration x_h . Man stellt fest, daß in der Tieftemperaturphase C die Magnetisierungskurve ein Plateau bei kleinen Störstellenkonzentrationen $x_h < x_h^c$ und mittleren Magnetfeldern H aufweist, dessen Wert $m^z = 1 - 3x_h/2$ beträgt, vgl. Abbildung (3.6). Dieses Plateau korrespondiert nicht zu dem vollständig polarisierten Grundzustand, der sich erst bei größeren Werten von H ausbildet und zu einem weiteren Magnetisierungsplateau bei $m^z = 1 - x_h/2$ führt. Ferner findet man, daß bei steigender Temperatur T die Plateaus langsam ausgeschmiert werden und schließlich völlig verschwinden [47]. Für $T \rightarrow 0$ entwickelt die magnetische Suszeptibilität an den Phasengrenzen Singularitäten, ein weiteres Indiz für einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Bemerkenswert ist auch, daß sich der Wert des Plateaus kontinuierlich in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h verändern läßt,

im Gegensatz zu den bisher bekannten Fällen, bei denen magnetische Isolatoren aufgrund topologischer Argumente auftreten [48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56].

3.1 Thermodynamische Bethe-Ansatz-Gleichungen

3.1.1 Diskrete Bethe-Ansatz-Gleichungen

Wie bereits erwähnt, bilden die in Kapitel 2 hergeleiteten diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen den Ausgangspunkt für den von M. TAKAHASHI sowie C. N. und C. P. YANG entwickelten thermodynamischen BETHE-Ansatz [27, 46]. Für die nachfolgenden Überlegungen erweist sich die SUTHERLANDSche Form der diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen als besonders geeignet [29, 38]:

$$\left(\frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i}\right)^L = \prod_{k \neq j}^{N_h + N_\downarrow} \frac{\lambda_j - \lambda_k + i}{\lambda_j - \lambda_k - i} \prod_{\alpha=1}^{N_h} \frac{\lambda_j - \nu_\alpha - i/2}{\lambda_j - \nu_\alpha + i/2}, \quad j = 1, \dots, N_h + N_\downarrow, \quad (3.1)$$

$$1 = \prod_{k=1}^{N_h + N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha - \lambda_k + i/2}{\nu_\alpha - \lambda_k - i/2}, \quad \alpha = 1, \dots, N_h. \quad (3.2)$$

Im Rahmen des algebraischen BETHE-Ansatzes ist jeder Eigenzustand $|\{\nu_\alpha\}, \{\lambda_j\}\rangle$ durch eine Lösung $\mathcal{S} = \{\nu_\alpha \in \mathbb{C} | \alpha = 1, \dots, N_h\} \cup \{\lambda_j \in \mathbb{C} | j = 1, \dots, N_h + N_\downarrow\}$ der obigen Gleichungen eindeutig charakterisiert: Als Pseudovakuum $|\Omega\rangle$ wurde der vollständig polarisierte und undotierte Zustand $\prod_{k=1}^L \otimes |\uparrow\rangle_k$ und als Graduierung des Hilfsraumes $\mathcal{V}^{(1|2)} [1] = 0$ sowie $[2] = [3] = 1$ gewählt. L ist die Länge des Systems, die o.B.d.A. als geradzahlig angenommen wird, und N_\downarrow bzw. N_h die Anzahl der geflippten Spins bzw. der Störstellen des Zustandes $|\{\nu_\alpha\}, \{\lambda_j\}\rangle$ bezüglich $|\Omega\rangle$. Jedem der N_h Störstellen und N_\downarrow Spinflips wird in (3.1) und (3.2) ein λ_j zugeordnet. Diese werden als Spinrapiditäten bezeichnet und sind mit dem Quasiimpuls durch $\lambda(p) = \tan(p)/2$ verknüpft. Zusätzlich wird jeder Störstelle N_h eine sogenannte Störstellenrapidität ν_α zugewiesen. Die Energie bzw. der Impuls eines Eigenzustandes $|\{\nu_\alpha\}, \{\lambda_j\}\rangle$ mit der Magnetisierung $M^z = L - N_h - N_\downarrow$ ist gerade:

$$E(\mathcal{S}) - H M^z - \mu N_h = \sum_{k=1}^{N_h + N_\downarrow} \left\{ H - \frac{2}{\lambda_k^2 + 1} \right\} - \sum_{\alpha=1}^{N_h} \left\{ \mu + \frac{1}{2} H \right\} - L H, \quad (3.3)$$

$$P(\mathcal{S}) \equiv \sum_{k=1}^{N_h + N_\downarrow} \frac{1}{i} \ln \left[\frac{\lambda_k + i}{\lambda_k - i} \right] \pmod{2\pi}. \quad (3.4)$$

Falls $|\{\nu_\alpha\}, \{\lambda_j\}\rangle$ ein Eigenzustand des Systems ist, so folgt aus der Symmetrie der BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.1) und (3.2), daß auch $|\{-\nu_\alpha\}, \{-\lambda_j\}\rangle$ sowie $|\{\nu_\alpha^*\}, \{\lambda_j^*\}\rangle$ BETHE-Ansatz-Zustände sind. Die durch die Lösungen \mathcal{S} von (3.1) und (3.2) charakterisierten Zustände sind Höchstgewichtseigenzustände, d.h.

$$\hat{S}^+ |\mathcal{S}\rangle = 0 \quad \text{sowie} \quad \hat{V}^+ |\mathcal{S}\rangle = \hat{W}^+ |\mathcal{S}\rangle = 0 \quad (3.5)$$

und somit nicht vollständig. Durch Anwenden der entsprechenden Absteigeoperatoren \hat{S}^- , \hat{V}^- und \hat{W}^- auf $|S\rangle$ erhält man weitere Eigenzustände des Modells. Die Vollständigkeit dieses erweiterten Systems von Eigenzuständen wurde für das supersymmetrische t - J -Modell bewiesen [75].

Ist die Anzahl der Störstellen N_h und der Spinflips N_\downarrow klein, so kann man (3.1) und (3.2) numerisch lösen und mittels (3.3) und (3.4) die Magnetisierung sowie die Energie- und Impulseigenwerte berechnen. Allerdings besteht auch bei diesem Zugang nicht die Möglichkeit, die explizite Form der korrespondierenden BETHE-Ansatz-Zustände zu berechnen. Im thermodynamischen Grenzfall $L \rightarrow \infty$ bei konstanter Störstellen- und Spinflipkonzentration, $x_h = N_h/L$ bzw. $n_\downarrow = N_\downarrow/L$, ist diese Methode jedoch nicht geeignet, da man (3.1) und (3.2) für unendlich viele Störstellen N_h und Spinflips N_\downarrow lösen müßte.

Verwendet man dagegen die von M. TAKAHASHI formulierte *String*-Hypothese [27], so kann der thermodynamische Limes von (3.1), (3.2) und (3.3), (3.4) kontrolliert durchgeführt werden. Für die hier betrachtete dotierte Spin $S = 1$ -Kette besagt die *String*-Hypothese, daß die allgemeinen Lösungen der SUTHERLANDSchen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.1), (3.2) asymptotisch durch reelle Störstellenrapiditäten $\nu_\alpha = x_\alpha + i\delta x_\alpha$, mit $x_\alpha \in \mathbb{R}$ und $\lim_{L \rightarrow \infty} \delta x_\alpha = 0$, sowie durch komplexwertige n -Strings für die Spinrapiditäten gegeben sind [45]:

$$\lambda_l^{n,j} = x_l^n + \frac{i}{2}(n+1-2j) + i\delta_j \quad \text{mit } x_l^n \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad \lim_{L \rightarrow \infty} \delta_j = 0$$

für alle $j = 1, \dots, n$, $l = 1, \dots, N_n$.

(3.6)

Die Anzahl der n -Strings der Länge $n \in \mathbb{N}$ wird mit N_n bezeichnet, die reellen Parameter x_l^n heißen reelle Zentren der $\lambda_l^{n,j}$. Man sieht, daß jeder Zustand bis auf die $N_Z = \sum_{n=1}^\infty N_n$ reellen Zentren der Spinrapiditäten und die N_h Störstellenrapiditäten durch die Anzahl der Störstellen N_h und durch eine sogenannte Konfiguration $\{N_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ charakterisiert werden kann.

Es ist nun zu zeigen, daß die komplexwertigen BETHE-Ansatz-Lösungen im thermodynamischen Grenzfall tatsächlich die geforderte n -String Struktur aufweisen und die Störstellenrapiditäten ν_α reellwertig sind. Da die Energie (3.3) und der Gesamtimpuls (3.4) des Zustandes $|\{\nu_\alpha\}, \{\lambda_j\}\rangle$ reelle Größen sein sollen, müssen sich die Spinrapiditäten λ_j symmetrisch bzgl. der reellen Achse anordnen, d.h. für jedes $\lambda_j \in \mathcal{S}$ ist auch $\lambda_j^* \in \mathcal{S}$. Dies hat zur Folge, daß die Störstellenrapiditäten ν_α nur reelle Werte annehmen können, wie man mit Hilfe von (3.2) zeigen kann. Einerseits gilt nämlich

$$1 = \prod_{k=1}^{N_h+N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha - \lambda_k + i/2}{\nu_\alpha - \lambda_k - i/2} \Leftarrow \text{Kehrwert bilden} \Rightarrow 1 = \prod_{k=1}^{N_h+N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha - \lambda_k - i/2}{\nu_\alpha - \lambda_k + i/2}, \quad (3.7)$$

andererseits aber auch

$$\begin{aligned} 1 = 1^* &= \left(\prod_{k=1}^{N_h+N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha - \lambda_k + i/2}{\nu_\alpha - \lambda_k - i/2} \right)^* = \prod_{k=1}^{N_h+N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha^* - \lambda_k^* - i/2}{\nu_\alpha^* - \lambda_k^* + i/2} \\ &= \prod_{j=1}^{N_h+N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha^* - \lambda_j - i/2}{\nu_\alpha^* - \lambda_j + i/2}, \quad \text{da } \forall \lambda_k \in \mathcal{S} \exists : \lambda_j \in \mathcal{S} : \lambda_j = \lambda_k^*. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Dies führt auf die folgende Bedingung für die Störstellenrapiditäten ν_α :

$$\prod_{k=1}^{N_h+N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha - \lambda_k - i/2}{\nu_\alpha - \lambda_k + i/2} = \prod_{k=1}^{N_h+N_\downarrow} \frac{\nu_\alpha^* - \lambda_k - i/2}{\nu_\alpha^* - \lambda_k + i/2}, \quad \forall \alpha = 1, \dots, N_h. \quad (3.9)$$

Anhand dieser Gleichung erkennt man sofort, daß $\nu_\alpha = \nu_\alpha^*$ gelten muß.

Für die Spinrapiditäten wird zunächst der Spezialfall betrachtet, daß ein Satz $\mathcal{S}_\lambda = \{\lambda_j \in \mathbb{C} \mid j = 1, \dots, N_h + N_\downarrow\}$ von Lösungen der BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.1), (3.2) vorliegt mit $\Im(\lambda_i) > \Im(\lambda_j)$ für $i < j$ und $\Re(\lambda_i) = \Re(\lambda_j) = x, \forall i, j$. Für λ_1 gilt dann:

$$\left| \frac{\lambda_1 + i}{\lambda_1 - i} \right| = \begin{cases} > 1 : \Im(\lambda_1) > 0 \\ < 1 : \Im(\lambda_1) < 0 \end{cases} \Rightarrow \left(\frac{\lambda_1 + i}{\lambda_1 - i} \right)^L \stackrel{L \rightarrow \infty}{\underset{=}{\longrightarrow}} \begin{cases} \infty : \Im(\lambda_1) > 0 \\ 0 : \Im(\lambda_1) < 0 \end{cases}. \quad (3.10)$$

Sei o.B.d.A $\Im(\lambda_1) = y > 0$, so folgt aus (3.10), daß für $L \rightarrow \infty$ auch die rechte Seite der diskreten BETHE-Ansatz-Gleichung (3.1) divergieren muß. Dies tritt nur dann auf, wenn einer der Nenner im Limes $L \rightarrow \infty$ gegen Null strebt: Da die Störstellenrapiditäten wie gesehen reellwertig sind und λ_1 nach Annahme einen nichtverschwindenden Imaginärteil hat, muß ein λ_2 existieren mit $\lim_{L \rightarrow \infty} (\lambda_1 - \lambda_2 + i) = 0$, d.h. $\lim_{L \rightarrow \infty} \lambda_2 = x + i(y - 1)$.

Analog zu den obigen Überlegungen kann man zeigen, daß für $L \rightarrow \infty$ alle λ 's über die Relation $\lambda_j = \lambda_1 + i(1 - j) = x + i(y + 1 - j)$ miteinander verknüpft sind. Aus der symmetrischen Anordnung der λ 's bzgl. der reellen Achse folgt, daß in dem hier betrachteten Spezialfall die SPinrapiditäten tatsächlich wie gefordert im thermodynamischen Limes einen *String* der Länge $N_h + N_\downarrow$ bilden:

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \lambda_{N_h+N_\downarrow+1-j}^* \Rightarrow y_1 = -(y_1 + 1 - N_h - N_\downarrow) \\ \Leftrightarrow y_1 &= (N_h + N_\downarrow - 1)/2 \Rightarrow \lambda_j = x_1 + i(N_h + N_\downarrow - 1 - 2j)/2. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Davon ausgehend kann man den allgemeinen Fall nun direkt ableiten: Die $N_h + N_\downarrow$ Störstellenrapiditäten λ_j des BETHE-Ansatz-Zustandes $|\{\nu_\alpha\}, \{\lambda_j\}\rangle$ bilden N_n *n-Strings* mit $N_h + N_\downarrow = \sum_{n=1}^\infty nN_n$.

Als nächstes sollen die $N_h + (N_h + N_\downarrow) = N_h + \sum_{n=1}^\infty nN_n$ diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.1,3.2) vereinfacht werden. Wie bereits gezeigt, ist jeder Zustand $|\{\nu_\alpha\}, \{\lambda_j\}\rangle$ einer gegebenen Konfiguration $\{N_h, \{N_n\}_n\}$ vollständig durch die reellen Störstellenrapiditäten x_α und die reellen Zentren x_l^n bestimmt. Verwendet man die *String-Hypothese* (3.6), so lassen sich die BETHE-Ansatz-Gleichungen schreiben als:

$$\begin{aligned} e_2(\lambda_l^{n,j})^L &= \left(\frac{\lambda_l^{n,j} + i}{\lambda_l^{n,j} - i} \right)^L = \left(\frac{x_l^n + i(n + 3 - 2j)/2}{x_l^n + i(n - 1 - 2j)/2} \right)^L \\ &= \prod_{m=1}^\infty \prod_{\substack{k=1 \\ (m,k,r) \neq (n,l,j)}}^{N_m} \prod_{r=1}^m \frac{\lambda_l^{n,j} - \lambda_k^{m,r} + i}{\lambda_l^{n,j} - \lambda_k^{m,r} - i} \prod_{\alpha=1}^{N_h} \frac{\lambda_l^{n,j} - x_\alpha - i/2}{\lambda_l^{n,j} - x_\alpha + i/2} \\ &= \prod_{(m,k,r) \neq (n,l,j)} \frac{x_l^n - x_k^m + i(n - m - 2j + 2r + 2)/2}{x_l^n - x_k^m + i(n - m - 2j + 2r - 2)/2} \\ &\quad \times \prod_{\alpha} \frac{x_l^n - x_\alpha + i(n - 2j)/2}{x_l^n - x_\alpha + i(n - 2j + 2)/2}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

$n \in \mathbb{N}, l = 1, \dots, N_n, j = 1, \dots, n$

mit der Funktion $e_n(x) = (x + in/2)/(x - in/2)$, bzw. als:

$$\begin{aligned} 1 &= \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{l=1}^{N_n} \prod_{j=1}^n \frac{x_{\alpha} - \lambda_l^{n,j} + i/2}{x_{\alpha} - \lambda_l^{n,j} - i/2} \\ &= \prod_{(n,l,j)} \frac{x_{\alpha} - x_l^n - i(n-2j)/2}{x_{\alpha} - x_l^n - i(n-2j+2)/2}, \quad \alpha = 1, \dots, N_h. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Diese Gleichungen eignen sich allerdings nicht für die weiteren Untersuchungen. Zuerst müssen in (3.12) und (3.13) die imaginären Anteile der *String*-Lösungen eliminiert werden. Dadurch entsteht ein Gleichungssystem, welches allein von $N_h + \sum_n N_n$ reellen Parametern $\{x_{\alpha}, \{x_l^n\}_n\}$ abhängt. Bildet man das Produkt $\prod_{j=1}^n e_2(\lambda_l^{n,j})^L$, das gerade der linken Seite von (3.12) entspricht, so hängt dies wie gewünscht nur noch von dem reellen Zentrum x_l^n ab:

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^n e_2(\lambda_l^{n,j})^L &= \prod_{j=1}^n \left(\frac{x_l^n + i(n+3-2j)/2}{x_l^n + i(n-1-2j)/2} \right)^L \\ &= \left(\frac{x_l^n + i(n+1)/2}{x_l^n - i(n+1)/2} \frac{x_l^n + i(n-1)/2}{x_l^n - i(n-1)/2} \right)^L \\ &= e_{n-1}^L(x_l^n) e_{n+1}^L(x_l^n). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Alle Faktoren des obigen Produkts heben sich bis auf die beiden Zähler für $j = 1, 2$ und die beiden Nenner für $j = n-1, n$ gerade gegenseitig weg. Im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ ergibt sich (3.12) zu:

$$e_{n-1}^L(x_l^n) e_{n+1}^L(x_l^n) = \prod_{j=1}^n \left\{ \prod_{(m,k,r) \neq (n,l,j)} \frac{\lambda_l^{n,j} - \lambda_k^{m,r} + i}{\lambda_l^{n,j} - \lambda_k^{m,r} - i} \prod_{\alpha=1}^{N_h} \frac{\lambda_l^{n,j} - x_{\alpha} - i/2}{\lambda_l^{n,j} - x_{\alpha} + i/2} \right\}. \quad (3.15)$$

Die rechte Seite der obigen Gleichung läßt sich noch weiter vereinfachen: Betrachtet man zunächst den zweiten Faktor des Produktes (3.15), so sieht man, daß sich auch hier analog zu (3.14) wieder alle Faktoren des Produktes bis auf $j = n$ im Zähler und $j = 1$ im Nenner gegenseitig wegheben:

$$\prod_{j=1}^n \frac{x_l^n - x_{\alpha} - i(n-2j)/2}{x_l^n - x_{\alpha} - i(n-2j+2)/2} = \frac{x_l^n - x_{\alpha} + in/2}{x_l^n - x_{\alpha} - in/2} = e_n(x_{\alpha} - x_l^n). \quad (3.16)$$

Um den ersten Faktor von (3.15) auszuwerten, spaltet man ihn in zwei Anteile auf. Der erste Anteil umfaßt alle Faktoren mit $(n, l) \neq (m, k)$ und kann analog zu (3.14), (3.16) berechnet werden:

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^n \prod_{r=1}^m \frac{\lambda_l^{n,j} - \lambda_k^{m,r} + i}{\lambda_l^{n,j} - \lambda_k^{m,r} - i} &= \prod_{j,r} \frac{x_l^n - x_k^m + i(n-m-2j+2r+2)/2}{x_l^n - x_k^m + i(n-m-2j+2r-2)/2} \\ &= \prod_{j=1}^n \left(\frac{x_l^n - x_k^m + i(n+m-2j)/2}{x_l^n - x_k^m + i(n-m-2j)/2} \right. \\ &\quad \times \left. \frac{x_l^n - x_k^m + i(n+m-2j+2)/2}{x_l^n - x_k^m + i(n-m-2j+2)/2} \right). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Durch eine geschickte Umordnung der Faktoren im Nenner, d.h. man ersetzt j durch $n-j+1$ und benutzt die Relationen $e_n(x) * e_n(-x) = 1 = e_{-n}(x) * e_n(x)$ und $e_0(x) = 1$, ergibt sich (3.17) zu:

$$\begin{aligned}
& \prod_{j=1}^n \frac{x_l^n - x_k^m + i(n+m-2j)/2}{x_l^n - x_k^m - i(n+m-2j+2)/2} \frac{x_l^n - x_k^m + i(n+m-2j+2)/2}{x_l^n - x_k^m - i(n+m-2j)/2} \\
&= \prod_{j=1}^n e_{n+m-2j}(x_l^n - x_k^m) e_{n+m+2-2j}(x_l^n - x_k^m) \\
&= \prod_{j=1}^{\min(n,m)-1} e_{n+m-2j}(x_l^n - x_k^m) \prod_{j=1}^{\min(n,m)} e_{n+m+2-2j}(x_l^n - x_k^m). \tag{3.18}
\end{aligned}$$

Bei der Berechnung des zweiten Anteils, d.h. für $n = m$ und $l = k$, muß man beachten, daß in der diskreten BETHE-Ansatz-Gleichung (3.1) das Produkt nur über $(m, k, r) \neq (n, l, j)$ läuft. Aufgrund der Tatsache, daß der Faktor mit $r = j$ fehlt, spielen die Korrekturen δ zu den *String*-Lösungen (3.6) eine wichtige Rolle und dürfen nicht vernachlässigt werden. Man erhält

$$\begin{aligned}
\prod_{\substack{r=1 \\ r \neq j}}^n \frac{\lambda_l^{n,j} - \lambda_l^{n,r} + i}{\lambda_l^{n,j} - \lambda_l^{n,r} - i} &= \prod_{\substack{r=1 \\ r \neq j}}^n \frac{r-j+1+\delta_j-\delta_r}{r-j-1+\delta_j-\delta_r} \\
&= (-1) \prod_{r=1}^n \frac{r-j+1+\Delta_{j,r}}{r-j-1+\Delta_{j,r}}, \quad \Delta_{j,r} = \delta_j - \delta_r \\
&= (-1) \begin{cases} -n(n-1)/\Delta_{1,2} : j=1 \\ \frac{\Delta_{j,j-1}(n+1-j)(n-j)}{\Delta_{j,j+1}j(j-1)} : j \neq 1, n \\ \Delta_{n,n-1}/n(n-1) : j=n \end{cases} \tag{3.19}
\end{aligned}$$

und wegen $\Delta_{n,m} = -\Delta_{m,n}$:

$$\begin{aligned}
\prod_{j=1}^n \prod_{\substack{r=1 \\ r \neq j}}^n \frac{\lambda_l^{n,j} - \lambda_l^{n,r} + i}{\lambda_l^{n,j} - \lambda_l^{n,r} - i} &= (-1)^{n-1} \frac{\Delta_{n,n-1}}{\Delta_{1,2}} \prod_{j=2}^{n-1} \frac{\Delta_{j,j-1}}{\Delta_{j,j+1}} \frac{(n+1-j)(n-j)}{j(j-1)} \\
&= \frac{\prod_{j=2}^n \Delta_{j,j-1} \prod_{j=2}^{n-1} (n+1-j)(n-j)}{\prod_{j=1}^{n-1} \Delta_{j+1,j} \prod_{j=2}^{n-1} j(j-1)} = 1. \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Mittels der Umformungen (3.14), (3.16) – (3.20) lassen sich die diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.12) dann wie folgt schreiben

$$\begin{aligned}
& e_{n+1}^L(x_l^n) e_{n-1}^L(x_l^n) \\
&= \prod_{\substack{m=1 \\ (m,k) \neq (n,j)}}^{\infty} \prod_{k=1}^{N_m} \left[\prod_{j=1}^{\min(m,n)-1} e_{m+n-2j}(x_l^n - x_k^m) \prod_{j=1}^{\min(m,n)} e_{m+n+2-2j}(x_l^n - x_k^m) \right] \tag{3.21}
\end{aligned}$$

$$\times \prod_{\alpha=1}^{N_h} e_n(x_\alpha - x_l^n), \quad \text{mit } n = 1, \dots, \infty \text{ und } j = 1, \dots, N_n, \tag{3.22}$$

wobei die Anzahl der Spinrapiditäten $N_h + N_\downarrow$ gerade gleich $\sum_{n=1}^{\infty} nN_n$ ist. Auf dieselbe Art kann man auch die imaginären Anteile der n -String-Lösungen in (3.13) eliminieren — die rechte Seite von (3.13) entspricht gerade (3.16) — und es ergibt sich das Gleichungssystem:

$$1 = \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{j=1}^{N_n} e_n(x_\alpha - x_l^n), \quad \alpha = 1, \dots, N_h. \quad (3.23)$$

Abschließend müssen noch die Energie- und Impulseigenwerte (3.3), (3.4) des durch die obigen Gleichungen (3.21) und (3.23) definierten Zustandes sowie dessen Magnetisierung M^z auf den neuen Satz $\mathcal{S}_N \cup \mathcal{S}_x$ von Parametern transformiert werden. Das Ergebnis dieser Umformungen ist:

$$\begin{aligned} E(\mathcal{S}_N, \mathcal{S}_x) - H M^z - \mu N_h &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{N_n} \left\{ nH - \frac{n+1}{(x_l^n)^2 + (\frac{n+1}{2})^2} - \frac{n-1}{(x_l^n)^2 + (\frac{n-1}{2})^2} \right\} \\ &\quad - \sum_{\alpha=1}^{N_h} \left\{ \mu + \frac{1}{2}H \right\} - LH, \\ P(\mathcal{S}_N, \mathcal{S}_x) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{N_n} \frac{1}{i} \ln \left[\frac{x_l^n + i(n+1)/2}{x_l^n - i(n+1)/2} \frac{x_l^n + i(n-1)/2}{x_l^n - i(n-1)/2} \right], \end{aligned} \quad (3.24)$$

bzw. $M^z = L + N_h/2 - \sum_{n=1}^{\infty} nN_n$.

3.1.2 Logarithmische Bethe-Ansatz-Gleichungen

Im weiteren erweist es sich als nützlich, den Logarithmus der BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.21) und (3.23) zu bilden, da die entsprechenden Produkte durch Summen ersetzt werden. Um die Symmetrie zwischen positiven und negativen x_α 's bzw. x_l^n 's zu erhalten, legt man den Schnitt in der komplexen Zahlenebene von i bis $i\infty$ und von $-i$ bis $-i\infty$. Dadurch erhält man die sogenannten logarithmischen BETHE-Ansatz-Gleichungen:

$$\begin{aligned} L \theta_{n,2}(x_l^n) &= 2\pi J_l^n + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{N_m} \Xi_{n,m}(x_l^n - x_k^m) - \sum_{\alpha=1}^{N_h} \theta_n(x_l^n - x_\alpha) \\ 0 &= 2\pi I_\alpha - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{N_n} \theta_n(x_\alpha - x_l^n). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Die hierbei neu auftretenden Größen J_l^n und I_α entstehen durch die Mehrdeutigkeit der Logarithmusfunktion in der komplexen Ebene und durch die Ersetzung:

$$\frac{1}{i} \ln \left[\frac{x - in/2}{x + in/2} \right] = i \ln e_n(x) = \pi + 2 \arctan \left(\frac{2x}{n} \right) = \pi + \theta_n(x). \quad (3.26)$$

Der Schnitt wurde hier gerade so gewählt, daß (3.26) für alle reelle Werte von x definiert ist. Die J_l^n bzw. I_α , die je nach der Anzahl der bei der Ersetzung (3.26) auftretenden π 's entweder ganz- oder halbzahlige sind, kann man als Quantenzahlen der BETHE-Ansatz-Zustände

interpretieren, da die Störstellenrapiditäten x_α und reellen Zentren x_l^n der n -Strings eindeutig durch eine Konfiguration $\{I_\alpha, \{J_l^n\}_n\}$ festgelegt werden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden in Gleichung (3.25) die nachfolgenden Definitionen verwendet:

$$\begin{aligned}\theta_{n,m}(x) &= \theta_{n+m-1}(x) + \theta_{n+m-3}(x) + \dots + \theta_{|n-m|+1}(x) \\ \Xi_{n,m}(x) &= \theta_{n+m}(x) + 2\theta_{n+m-2}(x) + \dots + 2\theta_{|n-m|+2}(x) + (1 - \delta_{n,m})\theta_{|n-m|}(x).\end{aligned}\quad (3.27)$$

3.1.3 Thermodynamischer Limes

Im thermodynamischen Limes kann man zu Teilchen- und Lochdichten übergehen. Dazu führt man die Zählfunktionen $z_c(x)$ bzw. $z_n(x)$ ein:

$$\begin{aligned}z_n(x) &= \frac{1}{2\pi}\theta_{n,2}(x) - \frac{1}{2\pi L} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{N_m} \Xi_{n,m}(x - x_k^m) + \frac{1}{2\pi L} \sum_{\alpha=1}^{N_h} \theta_n(x - x_\alpha), \\ z_c(x) &= \frac{1}{2\pi L} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{N_m} \theta_n(x - x_k^m).\end{aligned}\quad (3.28)$$

Die logarithmischen BETHE-Ansatz-Gleichung (3.25) lassen sich jetzt mit (3.28) kompakt schreiben als:

$$z_n(x_l^n) = \frac{J_l^n}{L}, \quad z_c(x_\alpha) = \frac{I_\alpha}{L}. \quad (3.29)$$

Diese Form erlaubt es, die Verteilung der möglichen Werte für die Quantenzahlen I_α und J_l^n bei einer gegebenen Konfiguration $\{N_h, \{N_n\}_n\}$ genauer zu untersuchen. Da der Arcustangens eine ungerade Funktion ist, müssen die möglichen Werte von I_α bzw. J_l^n symmetrisch um die Null verteilt sein:

$$\begin{aligned}-I_{MAX} &\leq I_1 \leq I_2 < \dots < I_{N_h} \leq I_{MAX}, \\ -J_{MAX}^n &\leq J_1^n < J_2^n < \dots < J_{N_n}^n \leq J_{MAX}^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.\end{aligned}\quad (3.30)$$

Um die Maximalwerte I_{MAX} bzw. J_{MAX}^n zu berechnen, die die Paritäten der Quantenzahlen festlegen, d.h. ob I_α und J_l^n ganz- oder halbzahlig sind, werden die Monotonieigenschaften der Zählfunktionen und des Arcustangens ausgenutzt. Mittels (3.28) sieht man, daß $z_c(x)$ und $z_n(x)$ extremal für $x = \infty$ werden, d.h. die Maximalwerte sind mit $\mathcal{I}(n, m) := \min(n, m)$ für $n \neq m$ und $\mathcal{I}(n, n) := n + 1/2$ gegeben durch:

$$\begin{aligned}I_{MAX} &= Lz_c(\infty) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{N_n} \theta_n(\infty) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} N_n, \\ J_{MAX}^n &= Lz_n(\infty) = \frac{L}{2\pi} \theta_{n,2}(\infty) - \frac{1}{2\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{N_m} \Xi_{n,m}(\infty) + \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^{N_h} \theta_n(\infty) \\ &= \frac{L}{2} \min(n, 2) - \sum_{m=1}^{\infty} N_m \mathcal{I}(n, m) + \frac{1}{2} (N_h - 1).\end{aligned}\quad (3.31)$$

Gibt man eine Konfiguration von Quantenzahlen $\{I_\alpha, \{J_l^n\}_n\}$ vor, die aus Zahlen $\{I_\alpha | \alpha = 1, \dots, N_h\}$ besteht und benennt die Lücken dieser Zahlenfolge im Intervall $[-I_{MAX}, I_{MAX}]$ mit \tilde{I}_α , $\alpha = L - N_h$, so ergeben sich nach (3.29) die entsprechende Störstellenverteilung und die dazu korrespondierende Lochverteilung. Dieses Konzept läßt sich analog auf die übrigen Quantenzahlen und Zählfunktionen ausweiten. Führt man die Dichten

$$\begin{aligned} L\rho(x)dx &= \text{Anzahl der Störstellen in } x\dots x + dx \\ L\tilde{\rho}(x)dx &= \text{Anzahl der korrespondierenden Löcher in } x\dots x + dx \\ L\sigma_n(x)dx &= \text{Anzahl der } n - \text{Strings in } x\dots x + dx \\ L\tilde{\sigma}_n(x)dx &= \text{Anzahl der korrespondierenden Löcher in } x\dots x + dx \end{aligned}$$

ein, so folgt:

$$\frac{\partial z_n(x)}{\partial x} = \sigma_n(x) + \tilde{\sigma}_n(x) \quad , \quad \frac{\partial z_c(x)}{\partial x} = \rho(x) + \tilde{\rho}(x). \quad (3.32)$$

Unter der Bedingung, daß im thermodynamischen Limes die Konzentrationen N_n/L und N_h/L konstant gehalten werden, können die Summen $1/L \sum_{l=1}^{N_n}$ und $1/L \sum_{\alpha=1}^{N_h}$ durch $\int dx \sigma_n(x)$ sowie $\int dx \rho(x)$ ersetzt werden. Mit Hilfe der Störstellen- bzw. n -String-Dichten läßt sich die differenzierte Form von Gleichung (3.29) darstellen als

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_n(x) &= \hat{A}_{n,2} * p(x) - \sum_{m=1}^{\infty} \hat{A}_{n,m} * \sigma_m(x) - \hat{a}_n * \rho(x), \\ \rho(x) + \tilde{\rho}(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} \hat{a}_n * \sigma_n(x), \end{aligned} \quad (3.33)$$

wobei die unbekannten Größen wie folgt definiert sind:

$$\begin{aligned} a_n(x) &= \frac{1}{\pi} \frac{n/2}{x^2 + (n/2)^2} \quad , \quad p(x) = \frac{1}{2 \cosh(\pi x)}, \\ A_{n,m}(x) &= \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \Xi_{n,m}(x) + \delta_{n,m} \delta(x). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Ferner soll

$$\hat{K} * f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x - x') f(x') \quad (3.35)$$

eine Faltung mit einem beliebigen Integrationskern $K(x)$ sein. Die Intervalle, in denen die Dichten ρ bzw. σ_n nicht verschwinden, hängen vom jeweilig betrachteten Zustand ab. Mittels ρ und σ_n und $\epsilon_n^{(0)}(x) = -2\pi \hat{A}_{n,2} * p(x)$ läßt sich die Energiedichte (3.24) schreiben als:

$$E/L = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(nH + \epsilon_n^{(0)}(x) \right) \sigma_n(x) + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\mu + \frac{H}{2} \right) \rho(x). \quad (3.36)$$

Ziel ist es, das Tieftemperaturverhalten der dotierten Spin $S = 1$ -Kette zu bestimmen: Das System befindet sich also im thermischen Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur

T , d.h. das Modell muß im Rahmen der kanonischen Gesamtheit gelöst werden. In diesem Fall ist das thermodynamische Potential nicht mehr die (innere) Energie E sondern die freie Energie F , die sich mittels einer LEGENDRE-Transformation von E bzgl. der Entropie S bestimmen läßt. Da die Entropie S des Systems mit Hilfe des algebraischen BETHE-Ansatzes nicht berechnet werden kann, verwendet man für die LEGENDRE-Transformation die von C. N. YANG vorgeschlagene kombinatorische Entropie S_{komb} , die sich wie folgt ableiten läßt [46]: Für vorgegebene Störstellendichte ρ und Lochdichte $\tilde{\rho}$ ist die Gesamtzahl der Störstellen und Löcher in einem Intervall der Länge dx gleich $L(\rho + \tilde{\rho})dx$. Die Anzahl der möglichen Anordnungen der $L\rho dx$ Störstellen und der $L\tilde{\rho}dx$ Löcher für das Intervall $[x, x + dx]$ ist damit:

$$\frac{[L(\rho + \tilde{\rho})dx]!}{[L\rho dx]![L\tilde{\rho}dx]!}. \quad (3.37)$$

Daher auch der Ausdruck kombinatorische Entropie — analoge Überlegungen gelten für die n -String-Dichten σ_n und $\tilde{\sigma}_n$. Bildet man den Logarithmus von (3.37), so ist dies der Beitrag des Intervalls $[x, x + dx]$ zu S_{komb} , für die man als Ergebnis erhält:

$$\begin{aligned} S_{komb}/L &= \sum_{n=1}^{\infty} \int dx \left(\sigma_n \ln \left[1 + \frac{\tilde{\sigma}_n}{\sigma_n} \right] + \tilde{\sigma}_n \ln \left[1 + \frac{\sigma_n}{\tilde{\sigma}_n} \right] \right) \\ &\quad + \int dx \left(\rho \ln \left[1 + \frac{\tilde{\rho}}{\rho} \right] + \tilde{\rho} \ln \left[1 + \frac{\rho}{\tilde{\rho}} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Die Fakultäten wurden in Gleichung (3.37) mittels der STIRLINGSchen-Formel $\ln(N!) \approx (N + 1/2) \ln(N) - N$ entwickelt und alle nicht extensiven Terme wurden vernachlässigt. Die Gleichgewichtsverteilungen der Dichten ergeben sich aus der Forderung, daß die freie Energie F im thermischen Gleichgewicht bzgl. ρ , $\tilde{\rho}$ und σ_n , $\tilde{\sigma}_n$ minimal sein soll — man beachte, daß ρ , $\tilde{\rho}$ und σ_n , $\tilde{\sigma}_n$ wegen (3.33) keine unabhängigen Variablen sind. Die Variation der Energiedichte (3.36) bzw. der Entropiedichte (3.38) liefert:

$$\delta E/L = \sum_{n=1}^{\infty} \int dx (nH + \epsilon_n^{(0)}(x)) \delta \sigma_n - \int dx (\mu + H/2) \delta \rho, \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \delta S_{komb}/L &= \sum_{n=1}^{\infty} \int dx \left(\delta \sigma_n \ln \left[1 + \frac{\tilde{\sigma}_n}{\sigma_n} \right] + \delta \tilde{\sigma}_n \ln \left[1 + \frac{\sigma_n}{\tilde{\sigma}_n} \right] \right) \\ &\quad \int dx \left(\delta \rho \ln \left[1 + \frac{\tilde{\rho}}{\rho} \right] + \delta \tilde{\rho} \ln \left[1 + \frac{\rho}{\tilde{\rho}} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Davon ausgehend, daß die Dichten $\delta \rho$ und $\delta \sigma_n$ unabhängig voneinander sind, kann man mit Hilfe der Gleichung (3.33) bzw. deren differentieller Form

$$\begin{aligned} \delta \tilde{\rho} &= \sum_n \hat{a}_n * \delta \sigma_n - \delta \rho, \\ \delta \tilde{\sigma}_n &= - \sum_m \hat{A}_{n,m} * \delta \sigma_m + \hat{a}_n * \delta \rho, \end{aligned} \quad (3.41)$$

die Größen $\delta\tilde{\rho}$ und $\delta\tilde{\sigma}_n$ in (3.40) eliminieren. Die Variation der Entropiedichte ist somit gegeben durch:

$$\begin{aligned} \delta S_{komb}/L = & \sum_{n=1}^{\infty} \int dx \delta\sigma_n \left(\ln[1 + e^{\epsilon_n/T}] + \hat{a}_n * \ln[1 + e^{-\kappa/T}] - \hat{A}_{n,m} * \ln[1 + e^{-\epsilon_m/T}] \right) \\ & + \int dx \delta\rho \left(\kappa/T + \hat{a}_n * \ln[1 + e^{-\epsilon_n/T}] \right). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Hierzu wurde die für symmetrische Integrationskerne $K(x) = K(-x)$ geltende Beziehung

$$\int dx g(x) \hat{K} * f(x) = \int dx \int dy g(x) K(x-y) f(y) = \int dx f(x) \hat{K} * g(x), \quad (3.43)$$

sowie die Definitionen für die als *Dressed-Energies* bezeichneten Funktionen κ und ϵ_n verwendet:

$$\begin{aligned} \epsilon_n = T \ln[\tilde{\sigma}_n/\sigma_n] & \Leftrightarrow \tilde{\sigma}_n/\sigma_n = \exp(\epsilon_n/T) \text{ bzw.} \\ \kappa = T \ln[\tilde{\rho}/\rho] & \Leftrightarrow \tilde{\rho}/\rho = \exp(\kappa/T). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Ausgehend von den beiden Gleichungen (3.39) und (3.42) läßt sich direkt ablesen, wann die freie Energiedichte minimal wird, d.h. $\delta F/L = \delta E/L - T\delta S_{komb}/L = 0$. Die so gewonnenen Gleichungen für die *Dressed-Energies* κ und ϵ_n heißen auch thermodynamische BETHE-Ansatz-Gleichungen und haben die Form:

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= nH + \epsilon_n^{(0)} + T \sum_{m=1}^{\infty} \{ \hat{A}_{n,m} - \delta_{n,m} \hat{1} \} * \ln[1 + e^{-\epsilon_m/T}] - T \hat{a}_n * \ln[1 + e^{-\kappa/T}], \\ \kappa &= -\mu - \frac{H}{2} - T \sum_{n=1}^{\infty} \hat{a}_n * \ln[1 + e^{-\epsilon_n/T}]. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Im thermischen Gleichgewicht läßt sich die freie Energiedichte F/L in Abhängigkeit von den *Dressed-Energies* schreiben als:

$$F/L = -T \sum_n \int dx \hat{A}_{n,2} * p(x) \ln[1 + \exp(-\epsilon_n/T)]. \quad (3.46)$$

Anstelle der Dichten ρ und σ_n kann man auch ρ und $\tilde{\sigma}_n$ als voneinander unabhängige Größen ansehen. Damit läßt sich eine alternative Form für die thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen ableiten. Zunächst muß die Gleichungen (3.33) so transformiert werden, daß sich die Dichten $\tilde{\rho}$ und σ_n als Funktionen von ρ und $\tilde{\sigma}_n$ schreiben lassen. Dazu benötigt man den zu $\hat{A}_{n,m}$ inversen Operator $\hat{A}_{n,m}^{-1}$

$$\begin{aligned} \hat{A}_{n,m}^{-1} &= \delta_{n,m} \delta(x) - \{ \delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m} \} p(x), \\ \sum_m \hat{A}_{n,m}^{-1} * A_{m,k}(x) &= \delta_{n,k} \delta(x), \end{aligned} \quad (3.47)$$

für den darüber hinaus auch noch $\sum_m \hat{A}_{n,m}^{-1} * m = 0$, $\sum_m \hat{A}_{n,m}^{-1} * \epsilon_n^{(0)}(x) = -2\pi \delta_{n,2} p(x)$ und $\sum_m \hat{A}_{n,m}^{-1} * a_m(X) = \delta_{n,1} p(x)$ gilt. Die erste Gleichung von (3.33) wird auf die gewünschte

Form gebracht, in dem man von links mit dem Operator $\hat{A}_{k,n}^{-1}$ multipliziert und anschließend über n summiert:

$$\sigma_n(x) = \delta_{2,n} - \sum_{m=1}^{\infty} \hat{A}_{n,m}^{-1} * \tilde{\sigma}_m(x) + \delta_{n,1} \hat{p} * \rho(x). \quad (3.48)$$

Ersetzt man in der zweiten Gleichung von (3.33) die n -String-Dichte σ_n durch den obigen Ausdruck, so erhält man mit $R_1(x) = (1 + a_2(x))^{-1}$ das Resultat:

$$\tilde{\rho}(x) = \hat{a}_2 * p(x) - \hat{R}_1 * \rho(x) - \hat{p} * \tilde{\sigma}_1(x). \quad (3.49)$$

Die Variationen der Energie- und Entropiedichte (3.39) und (3.40) ergeben sich dann mittels (3.48) und (3.49) zu:

$$\delta E/L = - \sum_{n,m=1}^{\infty} \int dx \delta \tilde{\sigma}_n \hat{A}_{n,m} * (mH + \epsilon_m^{(0)}) - \int dx \delta \rho (\mu - \hat{p} * \epsilon_1^{(0)}), \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned} \delta S_{komb}/L = & \int dx \delta \rho \left(\ln[1 + e^{\kappa/T}] - \hat{R}_1 * \ln[1 + e^{-\kappa/T}] + \hat{p} * \ln[1 + e^{\epsilon_1/T}] \right) \\ & + \sum_{n,m=1}^{\infty} \int dx \delta \tilde{\sigma}_n \left(\delta_{m,1} \ln[1 + e^{-\epsilon_n/T}] \right. \\ & \left. - \delta_{m,1} \delta_{n,1} \hat{p} * \ln[1 + e^{-\kappa/T}] - \hat{A}_{n,m}^{-1} * \ln[1 + e^{\epsilon_m/T}] \right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Die aus (3.50) und (3.51) hergeleiteten Gleichgewichtsbedingungen, führen auf die gewünschte, zu (3.45) äquivalente Form der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= -2\pi \delta_{n,2} p \\ &\quad - \delta_{n,1} T \hat{p} * \ln[1 + e^{\kappa/T}] + T \hat{p} * \ln[(1 + e^{\epsilon_{n+1}/T})(1 + e^{\epsilon_{n-1}/T})], \\ \kappa &= -\mu - 2\pi \hat{a}_2 * p - T \hat{p} * \ln[1 + e^{\epsilon_1/T}] - T \hat{R}_2 * \ln[1 + e^{-\kappa/T}], \end{aligned} \quad (3.52)$$

mit $R_2(x) = \hat{p} * a_1(x)$ und der Nebenbedingung $\lim_{n \rightarrow \infty} \epsilon_n(x)/n = H$. Anhand der obigen Gleichungen (3.52) sieht man, daß für beliebige Temperaturen T nur die drei Moden κ , ϵ_1 und ϵ_2 für gewisse Bereiche des μ - H -Phasendiagramms negative Werte annehmen können, da sowohl die Integrationskerne p und R_2 als auch $\ln[1 + \exp(\dots)]$ für alle Werte von x positiv sind und somit auch die entsprechenden Faltungen $\hat{p} * \ln[1 + \exp(\dots)]$ bzw. $\hat{R}_2 * \ln[1 + \exp(\dots)]$ stets größer als Null sein müssen. Die freie Energiedichte läßt sich damit im thermischen Gleichgewicht alternativ wie folgt darstellen

$$\begin{aligned} F/L &= E_0/L \\ &\quad - T \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) \ln[1 + e^{\epsilon_2/T}] - T \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{p} * a_2(x) \ln[1 + e^{-\kappa/T}], \end{aligned} \quad (3.53)$$

wobei $E_0 = -2$ die Grundzustandsenergie der Spin $S = 1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette für verschwindendes äußeres Magnetfeld H ist [39, 40, 41].

3.2 Tieftemperatur-Phasendiagramm

Für beliebige Temperaturen T erweisen sich die im vorangegangenen Abschnitt hergeleiteten thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.45) und (3.52) als nicht besonders nützlich, da ihre Struktur hochgradig nichtlinear ist, was ihre Lösung und damit auch die Berechnung der physikalischen Eigenschaften des Systems nahezu unmöglich macht. Beschränkt man sich auf den Grenzfall $T = 0$, so ergibt sich (3.45) aufgrund von $\lim_{T \rightarrow 0} T \ln[1 + \exp(\pm g(x)/T)] = g^\pm(x)$ mit $g^\pm(x) = \Theta(\pm g(x))g(x)$ zu:

$$\begin{aligned}\epsilon_n(x) &= nH + \epsilon_n^{(0)}(x) - \sum_{m=1}^{\infty} (\hat{A}_{n,m}^{-1} - \delta_{n,m} \hat{1}) * \epsilon_m^-(x) + \hat{a}_n * \kappa^-(x), \\ \kappa(x) &= -\left(\mu + \frac{H}{2}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{a}_n * \epsilon_n^-(x).\end{aligned}\quad (3.54)$$

Man erhält also ein lineares Integralgleichungssystem für die *Dressed-Energies*, das nur von den negativen Anteilen κ^- bzw. ϵ_n^- abhängt. Physikalisch bedeutet dies, daß der Grundzustand des Systems durch mehrere FERMI-Seen bzw. teilweise gefüllte Quasiteilchenbänder beschrieben werden kann, da $\epsilon_n < 0$ nach Gleichung (3.44) äquivalent zu $\tilde{\sigma}_n = 0$ ist (analog für κ und ρ). Ausgehend von den thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichung (3.52) konnte gezeigt werden, daß für beliebige Temperaturen nur die drei Anregungsmoden κ , ϵ_1 und ϵ_2 für gewisse Bereiche im μ - H -Phasendiagramm negative Werte annehmen können. Berücksichtigt man, daß die *Dressed-Energies* symmetrische Funktionen in x sind und $\epsilon_n(x) > \epsilon_n(x')$ sowie $\kappa(x) > \kappa(x')$ für $|x| > |x'|$ ist, d.h. $\epsilon_n(x) < 0 \Leftrightarrow |x| < X_n$ bzw. $\kappa(x) < 0 \Leftrightarrow |x| < X_h$ so reduziert sich (3.54) zu

$$\begin{aligned}\epsilon_n(x) &= nH + \epsilon_n^{(0)}(x) + \hat{a}_n * \kappa(x|\pm X_h) \\ &\quad - \{\hat{A}_{n,1} - \delta_{n,1} \hat{1}\} * \epsilon_1(x|\pm X_1) - \{\hat{A}_{n,2} - \delta_{n,2} \hat{1}\} * \epsilon_2(x|\pm X_2), \\ \kappa(x) &= -\mu - \frac{H}{2} + \hat{a}_1 * \epsilon_1(x|\pm X_1) + \hat{a}_2 * \epsilon_2(x|\pm X_2),\end{aligned}\quad (3.55)$$

mit $\hat{K} * f(x|X^\pm) = \int_{X^-}^{X^+} dx' K(x-x')f(x')$. Ausgehend von (3.33) erhält man bei $T = 0$ für die Störstellen- und *n-String*-Dichten:

$$\begin{aligned}\sigma_n(x) &= -\frac{1}{2\pi} \epsilon_n^{(0)}(x) - \hat{a}_n * \rho(x|\pm X_h) \\ &\quad - \{\hat{A}_{n,1} - \delta_{n,1} \hat{1}\} * \sigma_1(x|\pm X_1) - \{\hat{A}_{n,2} - \delta_{n,2} \hat{1}\} * \sigma_2(x|\pm X_2), \\ \rho(x) &= \hat{a}_1 * \sigma_1(x|\pm X_1) + \hat{a}_2 * \sigma_2(x|\pm X_2).\end{aligned}\quad (3.56)$$

Die Konzentrationen der Störstellen sowie der 1- und 2-Strings, die im Grundzustand als einzige einen endlichen Wert annehmen können, lassen sich mittels

$$n_n = \int_{-X_n}^{+X_n} dx \sigma_n(x) \quad \text{bzw.} \quad n_h = \int_{-X_h}^{+X_h} dx \rho(x) \quad (3.57)$$

berechnen. Dabei muß man berücksichtigen, daß aufgrund von Gleichung (3.56) die Konzentrationen keineswegs unabhängig voneinander sondern miteinander verknüpft sind. Ba-

sierend auf den Gleichungen (3.55) und (3.56) sowie dem Tieftemperaturlimites für die Dichte der freien Energie (3.46)

$$F/L = \int_{-X_1}^{+X_1} dx \hat{A}_{1,2} * p(x) \epsilon_1(x) + \int_{-X_2}^{+X_2} dx \hat{A}_{2,2} * p(x) \epsilon_2(x) \quad (3.58)$$

läßt sich das Tieftemperatur-Phasendiagramm der dotierten Spin $S=1$ -Kette bestimmen.

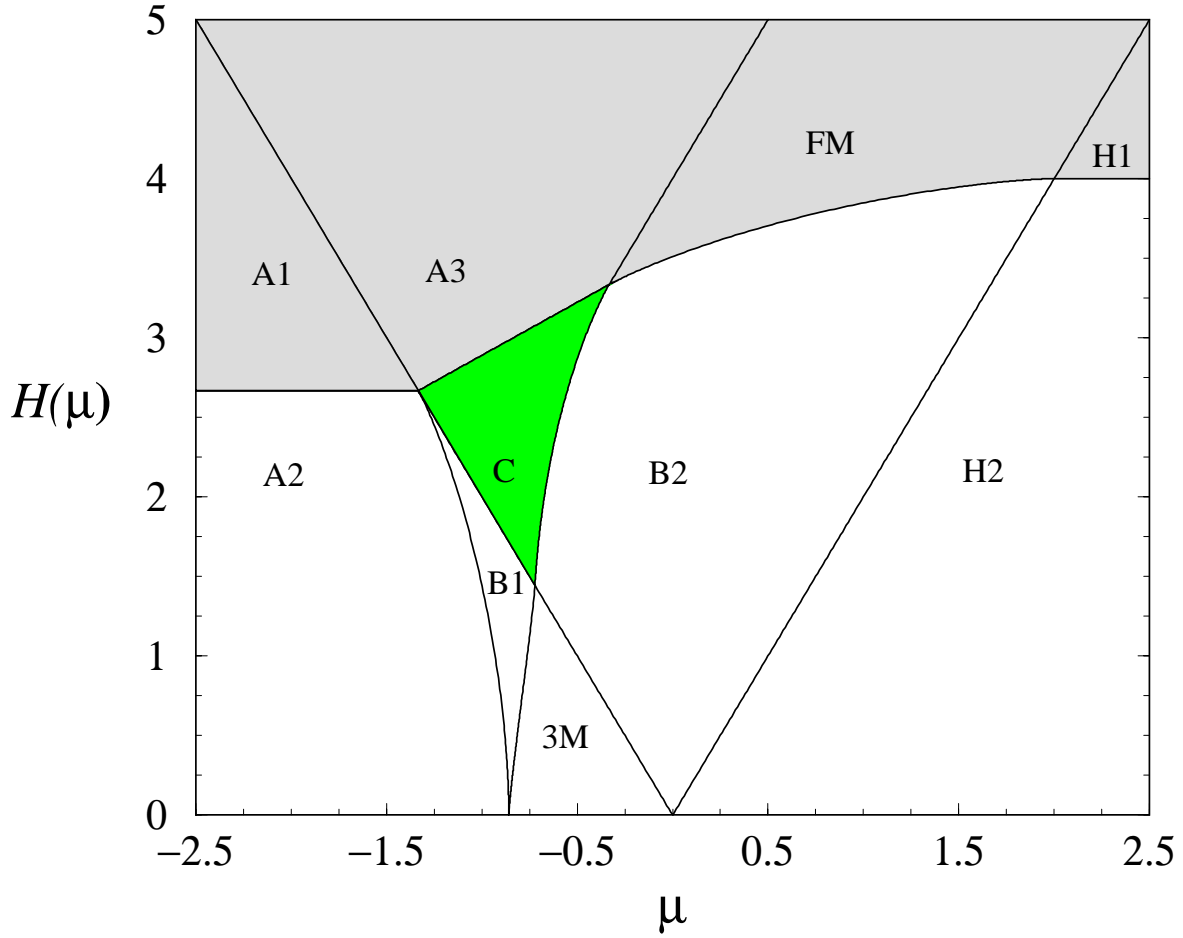


Abbildung 3.1. μ - H -Tieftemperatur-Phasendiagramm der dotierten Spin $S=1$ -Kette. Der hellgrau schraffierte Bereich korrespondiert zu einem ferromagnetisch geordneten Grundzustand, während der dunkelgraue Bereich gerade der nicht-trivialen Plateauphase C entspricht.

3.2.1 Phasenbereich $\mu < -H/2$

3.2.1.1 Spin $S=1$ -Takhtajan-Babujian Phase A1

Als erstes soll der Bereich des Phasendiagramms untersucht werden, in dem alle drei Anregungsmoden ϵ_1 , ϵ_2 und κ eine endliche Anregungslücke aufweisen. Dies ist äquivalent zu

den Bedingungen $\epsilon_n(x) \equiv \epsilon_n^+(x)$ und $\kappa(x) \equiv \kappa^+(x)$, $\forall x \in \mathbb{R}$ bzw. $X_n = 0$ und $X_h = 0$. Für diesen Spezialfall kann man die Lösungen der *Dressed-Energies* anhand von (3.55) direkt ablesen und erhält:

$$\epsilon_n(x) = nH + \epsilon_n^{(0)}(x), \quad n = 1, 2 \quad \text{und} \quad \kappa(x) = -\mu - \frac{H}{2}. \quad (3.59)$$

Mittels (3.59) und der Konsistenzbedingungen $\epsilon_n(x) \geq \epsilon_n(0) > 0$ mit $n = 1, 2$ und $\kappa(x) \geq \kappa(0) > 0$ lassen sich die Phasengrenzen dieser Phase zu

$$\kappa(X_h = \infty) = 0 \Rightarrow -\mu > -\mu_{A1/A3} = \frac{H}{2} \quad (3.60)$$

bzw.

$$\epsilon_2(X_2 = 0) = 0 \Rightarrow H > H_{A1/A2} = 8/3 \quad (3.61)$$

bestimmen. Da in dieser Phase die Integralgrenzen $X_1 = X_2 = X_h = 0$ sind, verschwinden nach Gleichung (3.57) die *String*- und Störstellenkonzentrationen. Der Grundzustand $|\Psi_{A1}\rangle$ ist also identisch mit dem für den algebraischen BETHE-Ansatz verwendeten Pseudovakuum $|\Omega\rangle = \prod_i \otimes |\uparrow\rangle_i$ und das Tieftemperatur-Anregungsspektrum ist charakterisiert durch endliche Energielücken.

3.2.1.2 Spin $S=1$ -Takhtajan-Babujian Phase A2

Ausgehend von der Tieftemperaturphase A1, in der alle drei Anregungsmoden eine Energielücke aufweisen, gelangt man durch Verringerung des äußeren magnetischen Feldes H unter den kritischen Wert $H_{A1/A2} = 8/3$ in die Phase A2. Diese Phase wird dadurch charakterisiert, daß die beiden Moden ϵ_1 und κ weiterhin eine Anregungslücke besitzen, während ϵ_2 masselos wird, d.h. $\epsilon_2(x) \equiv \epsilon_2^-(x)$, $\forall |x| \leq X_2$. Dies bedeutet, daß der Grundzustand $|\Psi_{A2}\rangle$ dieser Phase nicht mehr das Pseudovakuum $|\Omega\rangle$, sondern ein komplizierter undotierter Zustand mit Magnetisierung $m^z = 1 - 2n_2$ ist: Wegen (3.57) sieht man, daß aus $X_2 \neq 0$ und $X_1 = X_h = 0$ sofort $0 < n_2 < 1$ bzw. $n_1 = x_h = 0$ folgt. Das Tieftemperaturverhalten dieser Phase kann man aus einer einzigen skalaren linearen Integralgleichung für die Mode $\epsilon_2(x)$ bestimmen:

$$\epsilon_2(x) = 2H + \epsilon_2^{(0)}(x) - \{\hat{a}_4 + 2\hat{a}_2\} * \epsilon_2(x | \pm X_2) \quad \text{mit} \quad \epsilon_2(\pm X_2) = 0. \quad (3.62)$$

Die Lösung von (3.62) determiniert die übrigen Anregungsmoden vollständig:

$$\begin{aligned} \epsilon_n(x) &= nH + \epsilon_n^{(0)}(x) - \{\hat{A}_{n,2} - \delta_{n,2}\} * \epsilon_2(x | \pm X_2), \\ \kappa(x) &= -\mu - H/2 + \hat{a}_2 * \epsilon_2(x | \pm X_2). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Die Gleichungen (3.62) und (3.63) sind identisch mit den thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen der Spin $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette in einem äußeren Magnetfeld H [39, 40, 41]. Dies ist auch nicht weiter verwunderlich, da der HAMILTON-Operator der dotierten Spin $S=1$ -Kette für $x_h = 0$ gerade identisch dem der Spin $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette ist.

Für Magnetfelder H nahe der Phasengrenze A1/A2, d.h. $H = 8/3 - \delta H$ mit $0 < \delta H \ll 1$, kann man die *Dressed-Energy* ϵ_1 mit Hilfe einer TAYLOR-Entwicklung näherungsweise analytisch berechnen. In diesem Bereich sind die Größen δH und X_2 nach Voraussetzung klein, so daß die Konvergenz der entsprechenden TAYLOR-Reihen gewährleistet ist. Entwickelt man die Inhomogenität $\epsilon_2^{(0)}(x)$ und den Integrationskern $K(x) = a_4(x) + 2a_2(x)$ der Integralgleichung (3.62) jeweils bis zur zweiten Ordnung in x , wobei $\mathcal{O}(x) \simeq \mathcal{O}(X_2)$ sei, so erhält man für (3.62) den Ausdruck:

$$\epsilon_2(x) = -2\delta H + \frac{448}{27}x^2 - \frac{1}{\pi} \int_{-X_2}^{+X_2} dx' \left(\frac{5}{2} - \frac{17}{8}(x-x')^2 \right) \epsilon_2(x') + \mathcal{O}(x^3). \quad (3.64)$$

Mit einem Potenzreihenansatz für die Anregungsmode ϵ_2

$$\epsilon_2(x) = \epsilon_2^{(0,0)} + \epsilon_2^{(1,0)}X_2 + \epsilon_2^{(0,1)}x + \epsilon_2^{(2,0)}X_2^2 + \epsilon_2^{(1,1)}X_2x + \epsilon_2^{(0,2)}x^2 \quad (3.65)$$

ergibt sich die rechte Seite von (3.64) zu:

$$\epsilon_2(x) = -2\delta H + \frac{448}{27}x^2 - \frac{5}{\pi} \left(\epsilon_2^{(0,0)}X_2 + \epsilon_2^{(1,0)}X_2^2 \right) + \mathcal{O}(x^3). \quad (3.66)$$

Da $\epsilon_2(\pm X_2) = 0$, sind δH und X_2 keine unabhängigen Variablen, sondern miteinander verknüpft:

$$\epsilon_2(\pm X_2) = 0 \Rightarrow -2\delta H = \frac{5}{\pi} \epsilon_2^{(0,0)}X_2 + \left(\frac{5}{\pi} \epsilon_2^{(1,0)} - \frac{448}{27} \right) X_2^2. \quad (3.67)$$

Berücksichtigt man Beziehung (3.67) bei der Bestimmung von ϵ_2 mittels Koeffizientenvergleich, so findet man, daß sich die Anregungsmode ϵ_2 für kleine δH bzw. X_2 schreiben läßt als:

$$\epsilon_2(x) = \frac{448}{27} (x^2 - X_2^2) = -2\delta H + \frac{448}{27}x^2 \text{ mit } 2\delta H = \frac{448}{27}X_2^2. \quad (3.68)$$

In diesem Bereich des Phasendiagramms besitzen die magnetischen Anregungen ϵ_2 somit eine quadratischen Dispersionsrelation (3.68) und können als Magnonen identifiziert werden.

Einen weiteren Grenzfall, den man analytisch untersuchen kann, ist der Limes $H \rightarrow 0$. Hier findet man, daß die beiden FERMI-Punkte $\pm X_2$ wegen $\epsilon_2(\pm X_2) = 0$ bei $\pm \infty$ liegen. Der Grundzustand entspricht daher einem vollständig gefüllten FERMI-See von Magnonen. Gleichung (3.62) kann man aufgrund von $X_2 = \infty$ mit Hilfe einer FOURIER-Transformation exakt gelöst werden. Das führt zu folgendem Resultat:

$$(\hat{1} + 2\hat{a}_2 + \hat{a}_4) * \epsilon_2(x) = -2\pi \hat{a}_1 * (1 + a_2(x)) \Leftrightarrow \epsilon_2(\omega) = -2\pi \frac{a_1(\omega)}{1 + a_2(\omega)}. \quad (3.69)$$

Aus der Analyse der Spin $S = 1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette ist die obige Dispersionsrelation (3.69) bereits bekannt. Die magnetischen Anregungen sind in diesem Bereich die $S = 1/2$ -Spinonenanregungen über dem Magnonen-Kondensat.

Die linke Phasengrenze von A2 wird über die Bedingungen $\kappa(X_h = 0) = 0$ definiert, d.h. die Phase A2 wird für

$$\mu > \mu_{A2/B1} = -H/2 + \int_{-X_2}^{+X_2} dx a_2(x) \epsilon_2(x) \quad (3.70)$$

instabil gegenüber der Erzeugung von Störstellen. Für $H = 0$ läßt sich der kritische Wert $\mu_{A2/B1}$ exakt berechnen. Als Ergebnis erhält man:

$$\mu_{A2/B1} \Big|_{H=0} = \int_{-X_2}^{+X_2} dx a_2(x) \epsilon_2(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{a_3(\omega)}{1 + a_2(\omega)} = \psi(3/4) - \psi(5/4), \quad (3.71)$$

wobei $\psi(x) = d[\ln(\Gamma(z))]/dz$ die sogenannte Digamma-Funktion ist.

3.2.1.3 Tomonaga-Luttinger-Phase B1

Durch Erhöhung des chemischen Störstellenpotentials μ über den durch (3.70) festgelegten kritischen Wert $\mu_{A2/B1}$ gelangt man in den Bereich der Phase B1. Die Auswirkungen auf die Natur des Grundzustandes $|\Psi_{B1}\rangle$ sind dabei beachtlich: Zusätzlich zu dem FERMI-See der 2-Strings mit Energie $\epsilon_2 < 0$ tritt in dieser Phase ein weiterer für die Störstellenrapiditäten mit Energien $\kappa < 0$ auf. Wegen (3.57) bedeutet dies, daß hier die 2-String- sowie die Störstellenkonzentration n_2 bzw. x_h endliche Werte annehmen. Die Magnetisierung des Grundzustandes $|\Psi_{B1}\rangle$ beträgt demnach $m^z = 1 + x_h/2 - 2n_2$. Als effektive Beschreibung des Niederenergiesektors eignet sich daher ein zwei-komponentiges TOMONAGA-LUTTINGER-Modell, dessen beide Anregungsmoden ϵ_2 und κ den folgenden Dispersionsrelationen genügen müssen:

$$\begin{aligned} \epsilon_2(x) &= 2H + \epsilon_2^{(0)}(x) + \hat{a}_2 * \kappa(x|\pm X_h) - \{\hat{a}_4 + 2\hat{a}_2\} * \epsilon_2(x|\pm X_2), \\ \kappa(x) &= -\left(\mu + \frac{H}{2}\right) + \hat{a}_2 * \epsilon_2(x|\pm X_2) \quad \text{mit} \quad \kappa(\pm X_h) = 0 \text{ und } \epsilon_2(\pm X_2) = 0. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Für beliebige FERMI-Punkte X_2 bzw. X_h läßt sich dieses Gleichungssystem allerdings nicht mehr analytisch sondern nur noch numerisch lösen. Die beiden rechten Phasengrenzen werden aus den Bedingungen für die beiden FERMI-Punkte X_1 und X_h berechnet. Für B1/C erhält man

$$\kappa(X_h = \infty) = 0 \Rightarrow -\mu_{B1/C} = \frac{H}{2}, \quad (3.73)$$

d.h. der zu κ assoziierte FERMI-See ist vollständig gefüllt. Die andere Phasengrenze B1/3M ergibt sich aus $\epsilon_1(X_1 = 0) = 0$ zu:

$$H_{B1/3M} = 2 - \int_{-X_h}^{+X_h} dx a_1(x) \kappa(x) + \int_{-X_2}^{+X_2} dx \{a_3(x) + a_1(x)\} \epsilon_2(x). \quad (3.74)$$

3.2.1.4 Drei Moden Phase 3M

Die Besonderheit der Phase 3M besteht darin, daß hier alle drei Anregungsmoden ϵ_1 , ϵ_2 und κ masselos sind und man die thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.55) lösen muß, ohne sie vorher vereinfachen zu können. Der Grundzustand $|\Psi_{3M}\rangle$ besteht aus drei unterschiedlichen FERMI-Seen. Die dazu korrespondierenden Quasiteilchendichten sind jedoch keineswegs unabhängig voneinander, sondern aufgrund von $\epsilon_i(X_i) = 0$, $i = 1, 2$ und $\kappa(X_h) = 0$ parametrisch über das äußere Magnetfeld H und das chemische Störstellenpotential μ gekoppelt.

Für den Fall, daß das Magnetfeld H verschwindet ($X_1 = X_2 = \infty$) kann man die magnetische Suszeptibilität $\chi(H = 0)$ für $T = 0$ und die spezifische Wärme $C(T)$ für kleine Temperaturen T analytisch berechnen. Wegen $X_1 = X_2 = \infty$ lassen sich die beiden *Dressed-Energies* ϵ_1 und ϵ_2 in den thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.55) durch Integration eliminieren. Für κ ergibt sich danach die skalare Gleichung:

$$\kappa(x) = -\mu - 2\pi\hat{a}_2 * p(x) - \hat{R} * \kappa(x|\pm X_h). \quad (3.75)$$

Hier ist $R = \hat{a}_2 * (1 + a_2)^{-1}$ und die beiden FERMI-Punkte $\pm X_2$ hängen in diesem Bereich wegen $\kappa(X_2) = 0$ nur von dem chemischen Störstellenpotential μ ab. Analog dazu läßt sich zeigen, daß die Störstellendichte ρ folgender Gleichung genügen muß:

$$\rho(x) = \hat{a}_2 * p(x) - \hat{R} * \rho(x|\pm X_h). \quad (3.76)$$

Die FERMI-Geschwindigkeit v_h der masselosen Ladungsmoden κ läßt sich ausgehend von (3.75) und (3.76) bestimmen:

$$v_h = \frac{1}{2\pi\rho(X_h)} \left. \frac{\partial \kappa(x)}{\partial x} \right|_{x=X_h}. \quad (3.77)$$

Die Geschwindigkeiten v_1 und v_2 der beiden masselosen magnetischen Anregungen um $x \simeq X_1 = X_2 = \infty$ sind durch

$$v_1 = \lim_{X_1 \rightarrow \infty} \frac{\epsilon'_1(X_1)}{2\pi\sigma_1(X_1)} = \pi \frac{A}{B} \quad (3.78)$$

bzw.

$$v_2 = \lim_{X_2 \rightarrow \infty} \frac{\epsilon'_2(X_2)}{2\pi\sigma_2(X_2)} = \pi \quad (3.79)$$

gegeben, wobei $2\pi A = -\int_{-X_h}^{+X_h} dx e^{\pi x} \kappa(x)$ und $B = \int_{-X_h}^{+X_h} dx e^{\pi x} \rho(x)$ ist.

Um die spezifische Wärme $C \propto \partial_T F(T, \mu, H = 0)$ des Systems für kleine Temperaturen T berechnen zu können, muß man zuerst eine systematische Tieftemperaturentwicklung der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.52) durchführen, mit der sich die freie Energie $F(T \ll 1, \mu, H = 0)/L$ näherungsweise bestimmen läßt.

Basierend auf der von M. TAKAHASHI in [76] entwickelten Methode wurde gezeigt, daß sich die freie Energiedichte aus Gleichung (3.53) für niedrige Temperaturen T als $F/L = E_0/L + f_h + f_s$ schreiben läßt [45]. $E_0/L = 2$ ist hier der Beitrag, der von der

Spin $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette herrührt, während f_h bzw. f_s die jeweiligen Beiträge der Ladungsmoden κ und der magnetischen Moden ϵ_1 und ϵ_2 sind. Für den Beitrag des Ladungssektors erhält man [45]:

$$f_h = -T \int dx \rho(x) \ln[1 + e^{|\kappa(x)/T|}] \simeq -\frac{\pi T^2}{6v_h} \Rightarrow C_h \simeq \frac{\pi T}{3v_h}. \quad (3.80)$$

Da das obige thermodynamische Verhalten der spezifischen Wärme C_h gerade dem einer masselosen skalaren bosonischen Mode entspricht, verwendet man als effektive Tieftemperaturtheorie für den Ladungssektor eine bosonische $c_h = 1$ konforme Feldtheorie (vergleiche Kapitel 4).

Der Beitrag der magnetischen Freiheitsgrade zur freien Energiedichte f_s läßt sich für tiefe Temperaturen T schreiben als:

$$f_s = -\frac{\pi T^2}{6} \left(\frac{c_1}{v_1} + \frac{c_2}{v_2} \right) \Rightarrow C_s \simeq C_1 + C_2 = \frac{\pi T}{3} \left(\frac{c_1}{v_1} + \frac{c_2}{v_2} \right). \quad (3.81)$$

Diese Form von f_s ist charakteristisch für eine TOMONAGA-LUTTINGER-Flüssigkeit, deren beide Anregungsmoden durch die Geschwindigkeiten v_1 bzw. v_2 und deren zentrale Ladungen c_1 bzw. c_2 festgelegt werden. Die in (3.81) auftauchenden Parameter c_1 und c_2 sind wie folgt definiert:

$$c_1 = \frac{6}{\pi} \int dx A e^{-\pi x} \ln[1 + \exp(\phi_1(x))] \quad \text{und} \quad c_2 = \frac{6}{\pi} \int dx e^{-\pi x} \ln[1 + \exp(\phi_2(x))]. \quad (3.82)$$

und die oben verwendeten Funktionen ϕ_n sind temperaturunabhängig und genügen der Gleichung [41, 45]

$$\phi_n(x) = -A\delta_{n,1}e^{-\pi x} - \delta_{n,2}e^{-\pi x} + \hat{p} * \ln[1 + \exp(\phi_{n+1})][1 + \exp(\phi_{n-1})]. \quad (3.83)$$

Im allgemeinen kann man c_1 und c_2 nicht mit den zentralen Ladungen von zwei unitären konformen Feldtheorien identifizieren, da diese in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h reellwertige Funktionen sind, die die Nebenbedingung $c_1 + c_2 = 2$ erfüllen müssen.

Betrachtet man die beiden Grenzfälle eines undotierten ($x_h = 0$) bzw. eines vollständig dotierten Systems ($x_h = 1$), so erhält man ausgehend von Gleichung (3.82) für c_1 und c_2 als Ergebnis:

$$\begin{aligned} x_h &= 0 : c_1 = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad c_2 = 3/2, \\ x_h &= 1 : c_1 = c_2 = 1. \end{aligned} \quad (3.84)$$

In diesen beiden Grenzfällen läßt sich c_2 mit der zentralen Ladung eines $SU(2)_2$ bzw. $SU(2)_1$ WESS-ZUMINO-WITTEN-Modells identifizieren [77, 78]. Die Anregungsmoden ϵ_2 korrespondiert zu den masselosen Spinonenanregungen der $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette bzw. des isotropen $S=1/2$ -HEISENBERG-Modells. Die effektive Tieftemperaturtheorie der magnetischen Anregungsmoden ϵ_1 entspricht für $x_h = 0$ dem unitären minimalen Modell \mathcal{M}_3 , das das kritische Verhalten des ISING-Modells beschreibt, bzw. für $x_h = 1$

einer freien bosonischen Feldtheorie mit $c_1 = 1$ und Kompaktifizierungsradius $R = 1/\sqrt{2}$ [45, 79].

Um die magnetische Suszeptibilität χ des Systems bei $T = 0$ bestimmen zu können, muß man den magnetfeldabhängigen Teil der Grundzustandsenergie für kleine H entwickeln. Anhand der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.93) sieht man, daß bei einem kleinen Magnetfeld H die beiden FERMI-Punkte $X_{1/2}$ der magnetischen Anregungen nicht mehr bei unendlich liegen: $1 \ll X_{1/2} < \infty$. Untersucht man nun das asymptotische Verhalten $x \simeq X_{1/2}$, so läßt sich für kleine Magnetfelder H ein Integralgleichungssystem vom WIENER-HOPF-Typ für ϵ_1 und ϵ_2 bzw. σ_1 und σ_2 ableiten [79]:

$$\begin{aligned}\epsilon_1(x) &= -2\pi A e^{-\pi|x|} + \int_{+X_1}^{+\infty} dy K_{11}(x-y)\epsilon_1(y) + \int_{+X_2}^{+\infty} dy K_{12}(x-y)\epsilon_2(y), \\ \epsilon_2(x) &= \frac{H}{2} - 2\pi e^{-\pi|x|} + \int_{+X_1}^{+\infty} dy K_{21}(x-y)\epsilon_1(y) + \int_{+X_2}^{+\infty} dy K_{22}(x-y)\epsilon_2(y),\end{aligned}\quad (3.85)$$

bzw.

$$\begin{aligned}\sigma_1(x) &= B e^{-\pi|x|} + \int_{+X_1}^{+\infty} dy K_{11}(x-y)\sigma_1(y) + \int_{+X_2}^{+\infty} dy K_{12}(x-y)\sigma_2(y), \\ \sigma_2(x) &= e^{-\pi|x|} + \int_{+X_1}^{+\infty} dy K_{21}(x-y)\sigma_1(y) + \int_{+X_2}^{+\infty} dy K_{22}(x-y)\sigma_2(y).\end{aligned}\quad (3.86)$$

Der Integrationskern \mathbb{K} hat die folgende FOURIER-Darstellung:

$$\mathbb{K}(\omega) = \frac{1}{2 \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right)} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & e^{-|\omega|/2} \end{pmatrix} = p(\omega) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & a_1(\omega) \end{pmatrix}. \quad (3.87)$$

Die Lösung der obigen Gleichung ist äquivalent zur Lösung des RIEMANN-HILBERT-Problems für eine reguläre Matrix $\mathbb{Z}(\omega)$ mit

$$\begin{aligned}(a) \quad & \mathbb{Z}(\omega) \rightarrow 1 \text{ für } \omega \rightarrow \infty \\ (b) \quad & \mathbb{Z}(\omega) \text{ ist analytisch für alle } \omega \notin \mathbb{R} \\ (c) \quad & \mathbb{Z}_-(\omega) = \mathbb{Z}_+(\omega)\mathbb{G}(\omega), \quad \omega \in \mathbb{R},\end{aligned}\quad (3.88)$$

wobei die Matrix $\mathbb{G}(\omega)$ mit dem Integrationskern \mathbb{K} wie folgt zusammenhängt:

$$\mathbb{G}(\omega) = \begin{pmatrix} e^{i\omega X_1} & 0 \\ 0 & e^{i\omega X_2} \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \mathbb{K}(\omega) \right\} \begin{pmatrix} e^{-i\omega X_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega X_2} \end{pmatrix}. \quad (3.89)$$

In Abhängigkeit von $\mathbb{Z}(\omega)$ läßt sich die magnetische Suszeptibilität χ dann als:

$$\chi = \frac{1}{4\pi} \left(\mathbb{G}^{-1}(0) [\mathbb{Z}_+(0)]^{-1} \mathbb{Z}_+^T(i\pi) \begin{pmatrix} v_1 & 0 \\ 0 & v_2 \end{pmatrix} ([\mathbb{Z}_+(0)]^{-1} \mathbb{Z}_+^T(i\pi))^{-1} \right)_{22}. \quad (3.90)$$

Für verschwindendes äußeres Magnetfeld H und kleine Störstellenkonzentrationen x_h — äquivalent zu kleinem A — vereinfacht sich dies weitgehend, und man erhält für χ den Ausdruck [79]

$$\chi = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1-\xi}{v_2} + \frac{\xi}{v_1} \right), \quad (3.91)$$

wobei $\xi = -A\{\log(A/2\pi) + 2C\}/2\pi + \mathcal{O}(A^2)$ ist, und die Konstante $A = -\int_{-X_2}^{+X_2} dx e^{\pi x} \kappa(x)$ in x_h TAYLOR-entwickelt werden kann. Der Beitrag der Anregungsmode ϵ_1 zur magnetischen Suszeptibilität ist gegeben durch [79]:

$$\chi_1 = \frac{3x_h}{2\pi^3} (\log x_h + 0.217827...) . \quad (3.92)$$

3.2.2 Phasenbereich $-H/2 < \mu < H/2$

Betrachtet man die thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.55), so sieht man, daß für den Bereich des Phasendiagramms $-\mu > H/2$ die Mode κ für alle Werte von x negativ ist. Dies bedeutet, daß im Grundzustand immer ein vollständig gefülltes Quasiteilchenband vorliegt, das mit den Störstellenrapiditäten verknüpft ist und eine endliche Lochanregungslücke besitzt. Somit läßt sich $\kappa(x)$ aus den Gleichungen (3.55) durch Ausintegrieren eliminieren. Als effektive thermodynamische BETHE-Ansatz-Gleichungen für die Moden $\epsilon_1(x)$ und $\epsilon_2(x)$ im Grenzfall $T = 0$ erhält man die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \epsilon_1(x) &= -\mu + \frac{H}{2} + \epsilon_1^{(0)}(x) - \hat{a}_1 * \epsilon_2(x|\pm X_2), \\ \epsilon_2(x) &= -\mu + \frac{3H}{2} + \epsilon_2^{(0)}(x) - \hat{a}_1 * \epsilon_1(x|\pm X_1) - 2\hat{a}_2 * \epsilon_2(x|\pm X_2). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Diese dienen als Ausgangspunkt für die weiteren Untersuchungen im Phasenbereich $-H/2 < \mu < H/2$.

3.2.2.1 Spin $S=1$ Takhtajan-Babujian Phase A3

Die Phase A3 existiert bei hohen äußeren Magnetfeldern H . Die beiden Anregungsmoden ϵ_1 und ϵ_2 weisen jeweils eine endliche Energielücke auf, was gleichbedeutend mit dem Verschwinden der FERMI-Punkte $X_{1/2} = 0$ ist. Aus diesem Grund kann die Lösung der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.93) wie im Fall der Phase A1 direkt abgelesen werden und ist gerade durch die entsprechenden Inhomogenitäten der Integralgleichungen gegeben:

$$\epsilon_1(x) = -\mu + \frac{H}{2} + \epsilon_1^{(0)}(x), \quad \epsilon_2(x) = -\mu + \frac{3H}{2} + \epsilon_2^{(0)}(x). \quad (3.94)$$

Anhand von Gleichung (3.44) ist offensichtlich, daß auch in diesem Bereich des Phasendiagramms für $T = 0$ die Dichten der n -Strings aufgrund der Bedingung $\epsilon_n > 0$ und wegen (3.56) auch die Störstellendichte ρ verschwinden. Somit ist der Grundzustand $|\Psi_{A3}\rangle$ identisch mit dem ferromagnetisch geordneten Eigenzustand $|\Omega\rangle$ der Spin $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette. Die beiden noch nicht bestimmten Phasengrenzen werden wieder über $\epsilon_i(X_i = 0) = 0$ definiert, $i = 1, 2$, und lassen sich exakt berechnen:

$$\begin{aligned} \epsilon_1(X_1 = 0) = 0 &\Rightarrow \mu_{A3/FM} = \frac{H}{2} - 2 \quad \text{und} \quad H > \frac{10}{3}, \\ \epsilon_2(X_2 = 0) = 0 &\Rightarrow \mu_{A3/C} = \frac{3H}{2} - \frac{16}{3} \quad \text{mit} \quad \frac{8}{3} < H < \frac{10}{3}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

3.2.2.2 Ferromagnetisch geordnete Phase FM

Erhöht man ausgehend von der TAKHTAJAN-BABUJIAN-Phase A3 das chemische Störstellenpotential μ , daß man die Phasengrenze $\mu_{A3/FM} = H/2 - 2$ mit $H > 10/3$ überschreitet, so führt dies zu einer allmählichen Dotierung des Grundzustandes $|\Psi_{FM}\rangle$ mit Störstellen. Allerdings ist das äußere Magnetfeld H in diesem Bereich noch stark genug, um Spinflips vollständig zu unterdrücken, d.h. $|\Psi_{FM}\rangle$ ist immernoch ferromagnetisch geordnet. Die Magnetisierung des Systems ist daher durch $m^z = 1 - x_h/2$ gegeben. Anhand der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.93) der *Dressed-Energies*, sieht man, daß die Mode ϵ_2 weiterhin eine Anregungslücke aufweist, wohingegen ϵ_1 masselos wird. Aus (3.93) läßt sich für ϵ_1 die Dispersionrelation, die das Tieftemperaturverhalten dieser Phase eindeutig bestimmt, ableiten:

$$\epsilon_1(x) = -\mu + \frac{H}{2} + \epsilon_1^{(0)}(x). \quad (3.96)$$

Aufgrund der einfachen Struktur von (3.96) lassen sich fast alle Größen exakt berechnen. Für den FERMI-Punkt $\epsilon_1(X_1) = 0$ erhält man als Ergebnis $X_1 = \sqrt{\frac{4+2\mu-H}{H-2\mu}}$. Die Lochkonzentration x_h ergibt sich zu:

$$x_h = n_1 = -\frac{1}{2\pi} \int_{-X_1}^{+X_1} dx \epsilon_1^{(0)}(x) = \int_{-X_1}^{+X_1} dx a_2(x) = \frac{2}{\pi} \arctan(X_1). \quad (3.97)$$

Den Gültigkeitsbereich der Phase FM schränken zusätzlich zu A3/FM die beiden Bedingungen $\epsilon_1(X_1 = \infty) = 0$ und $\epsilon_2(X_2 = 0) = 0$ ein. Dies führt auf die beiden Phasengrenzen FM/H1 und FM/B2. Für FM/H1 erhält man das Ergebnis

$$\epsilon_1(X_1 = \infty) = 0 \Rightarrow \mu_{FM/H1} = \frac{H}{2}, \quad (3.98)$$

während wegen

$$\epsilon_2(x) = -\mu + \frac{3}{2}H + \epsilon_2^{(0)}(x) - \hat{a}_1 * \epsilon_1(x | \pm X_1) \quad (3.99)$$

und $\epsilon_2(X_2 = 0) = 0$ die Phasengrenze FM/B2 durch den Ausdruck

$$\mu_{FM/B2} = \frac{3}{2}H - \frac{16}{3} - \int_{-X_1}^{+X_1} dx' a_1(x - x') \epsilon_1(x') \quad (3.100)$$

gegeben ist. Im Falle kleiner Störstellenkonzentrationen x_h bzw. X_2 läßt sich analog zum Vorgehen in Phase A2 eine TAYLOR-Entwicklung durchführen. Für x_h und H ergeben sich in vierter Ordnung in X_1 die Resultate:

$$\begin{aligned} x_h &= \frac{2}{\pi} X_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} X_1^2 \right\} + \mathcal{O}(X_1^5), \\ H_{FM/B2} &= \frac{10}{3} + 2X_1^2 - \frac{16}{3} X_1^3 - 2X_1^4 + \mathcal{O}(X_1^5). \end{aligned} \quad (3.101)$$

Damit läßt sich die Phasengrenze FM/B2 in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h schreiben als:

$$H_{FM/B2} = \frac{10}{3} + \frac{\pi^2}{2} x_h^2 - \frac{2\pi^2}{3} x_h^3 - \frac{\pi^4}{24} x_h^4 + \mathcal{O}(x_h^5). \quad (3.102)$$

3.2.2.3 Phase C

Um in diese Phase zu gelangen, muß man ausgehend von der TAKHTAJAN-BABUJIAN-Phase A3 das äußere Magnetfeld H so weit reduzieren, daß $\mu > 3H/2 - 16/3$ wird. In diesem Fall wird die Anregungsmode ϵ_2 masselos. Der Grundzustand $|\Psi_C\rangle$ besteht somit aus zwei FERMI-Seen. Zusätzlich zu dem bereits erwähnten FERMI-See der Störstellenrapiditäten, der vollständig gefüllt ist und eine endliche Lochanregungslücke aufweist, tritt hier der See der 2-Strings auf. Für niedrige Temperaturen kann man daher das physikalische Verhalten durch eine 1-Moden-Theorie mit der Dispersion

$$\epsilon_2(x) = -\mu + \frac{3}{2}H + \epsilon_2^{(0)}(x) - 2\hat{a}_2 * \epsilon_2(x|\pm X_2) \quad (3.103)$$

beschreiben, wobei die beiden FERMI-Punkte wegen $\epsilon_2(\pm X_2) = 0$ wie gewohnt von dem äußeren Magnetfeld H und dem chemischen Störstellenpotential μ über die Kombination $-\mu + 3H/2$ abhängen. Bemerkenswert ist, daß der Phasenübergang FM/C viel drastischere Auswirkungen auf den Grundzustand hat als z.B. FM/A3, obwohl bei oberflächlicher Betrachtung der einzige Unterschied darin besteht, daß anstelle der Anregungsmode ϵ_1 hier ϵ_2 masselos wird. In dieser Phase weist der Grundzustand $|\Psi_C\rangle$ nämlich nicht nur eine endliche Störstellenkonzentration x_h auf, sondern zusätzlich auch eine endliche Spinflipkonzentration $n_\downarrow = 2n_2 - x_h$. Die rechte Phasengrenze von C ist durch $\epsilon_1(X_1 = 0) = 0$ definiert, was auf die nachfolgende Relation führt:

$$H_{C/B2} = 2\mu + 2 - \int_{-X_2}^{+X_2} dx' a_1(x - x') \epsilon_2(x'). \quad (3.104)$$

Für kleine X_2 bzw. x_h kann man ähnlich wie in Phase A2 und FM die beiden Phasengrenzen B1/C und C/B2 mit Hilfe einer TAYLOR-Entwicklung in x_h aus (3.73) bzw. (3.104) und (3.56), (3.57) näherungsweise analytisch berechnen. Für die vierte Ordnung in x_h erhält man als Resultat für die Phasengrenze B1/C bzw. C/B2:

$$H_{B1/C} = \frac{8}{3} - \frac{7\pi^2}{24}x_h^2 - \frac{7\pi^2}{12}x_h^3 - \left\{ \frac{105\pi^2}{128} - \frac{85\pi^4}{4608} \right\} x_h^4 + \mathcal{O}(x_h^5), \quad (3.105)$$

$$H_{C/B2} = \frac{10}{3} - \frac{7\pi^2}{12}x_h^2 - \frac{7\pi^2}{8}x_h^3 - \left\{ \frac{63\pi^2}{64} - \frac{85\pi^4}{2304} \right\} x_h^4 + \mathcal{O}(x_h^5). \quad (3.106)$$

3.2.2.4 Tomonaga-Luttinger-Phase B2

Für $T = 0$ ist dieser Bereich des Phasendiagramms dadurch definiert, daß für die FERMI-Punkte die Bedingungen $X_h = \infty$ bzw. $0 < X_i < \infty$ gelten, $i = 1, 2$. Demnach kann man als effektives Modell für die Tieftemperatureigenschaften des Systems eine TOMONAGA-LUTTINGER-Flüssigkeit für die beiden masselosen Anregungen ϵ_1 und ϵ_2 verwenden, die der Dispersionsrelation (3.93) genügen müssen — analog zu dem Fall der Phase B1 kann man (3.93) für beliebige FERMI-Punkte X_1 und X_2 jedoch nur numerisch lösen. Der Grundzustand $|\Psi_{B2}\rangle$ besteht wieder aus zwei, teilweise gefüllten Quasiteilchenbänder für die 1-

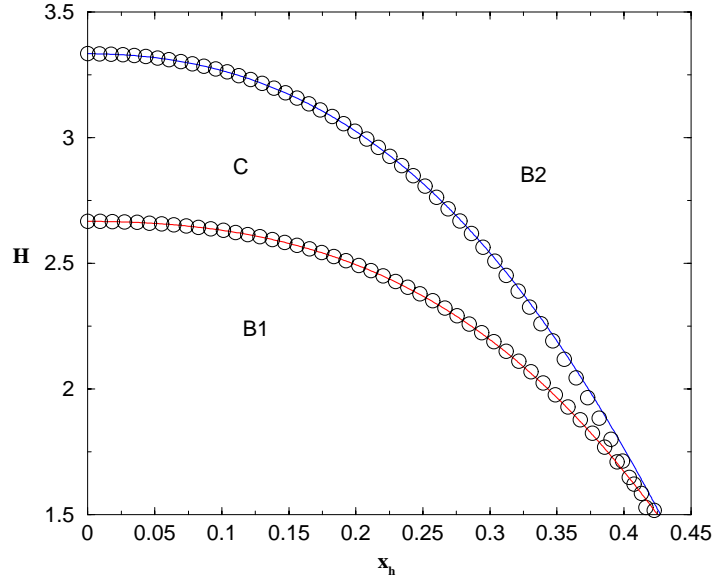


Abbildung 3.2. In dieser Abbildung sind die beiden Phasengrenzen B1/C und C/B2 in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h aufgetragen. Die durchgezogene Linien korrespondieren dabei zu den numerisch exakten Ergebnissen, während die anderen Kurven mittels (3.105) und (3.106) berechnet wurden.

und 2-Strings, die wegen $\epsilon_i(X_i) = 0$ und $X_h = \infty$ sowohl mit den magnetischen als auch den Ladungsfreiheitsgraden des Systems zusammenhängen, nämlich $x_h = n_1 + n_2$. Die rechte Phasengrenze von B2 kann man mit Hilfe von $\epsilon_1(X_1 = 0) = 0$ bestimmen:

$$\mu_{B2/H2} = H/2. \quad (3.107)$$

3.2.3 Phasenbereich $\mu > H/2$

Anhand der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.55) sieht man, daß die beiden Anregungsmoden ϵ_1 und κ im Falle $\mu > H/2$ für beliebige x nur negative Werte annehmen. Dies bedeutet, daß der Grundzustand dieser Tieftemperaturphase(n) aus zwei vollständig gefüllten FERMI-Seen von 1-String- bzw. Störstellenrapiditäten besteht, die jeweils eine endliche Lochanregungslücke aufweisen, $\epsilon_1(\infty), \kappa(\infty) < 0$, und damit für die Tieftemperatureigenschaften des Systems irrelevant sind. Sowohl ϵ_1 als auch κ lassen sich aus (3.55) durch Ausintegrieren eliminieren. Für die einzig nicht-triviale Anregungsmoden ϵ_2 , die das Tieftemperaturverhalten des Systems vollständig bestimmt, ergibt sich damit die folgende Dispersionsrelation:

$$\epsilon_2(x) = H - 2\pi a_1(x) - \hat{a}_2 * \epsilon_2(x | \pm X_2). \quad (3.108)$$

Die übrigen *Dressed-Energies* lassen sich in Abhängigkeit von ϵ_2 schreiben:

$$\begin{aligned} \kappa(x) &= -2\mu + \hat{a}_1 * \epsilon_2^{(0)}(x) \text{ und } \epsilon_1(x) = -\mu + \frac{H}{2} + \epsilon_1^{(0)}(x) - \hat{a}_1 * \epsilon_2(x | \pm X_2), \\ \epsilon_n(x) &= (n-1)H - 2\pi a_{n-1}(x) - (\hat{a}_n + \hat{a}_{n-2}) * \epsilon_2(x | \pm X_2), \text{ für } n > 2. \end{aligned} \quad (3.109)$$

Gleichungen (3.108) und (3.109) entsprechen den thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen des isotropen Spin $S = 1/2$ -HEISENBERG-Modells [80]. Somit ist in diesem Bereich die Störstellenkonzentration $x_h = 1$, d.h. es liegt eine vollständig dotierte Spin $S = 1$ -Kette vor.

Für große äußere Magnetfelder H bildet sich eine Phase H1 aus, in der im Grundzustand $|\Psi_{H1}\rangle$ ferromagnetische Ordnung auftritt. Dies ist äquivalent zu der Bedingung, daß die Mode ϵ_2 eine endliche Anregungslücke aufweist: $X_2 = 0$ und $\epsilon_2(X_2 = 0) > 0$. Die Magnetisierung des Grundzustandes $|\Psi_{H1}\rangle$ entspricht $m^z = 1/2$. Verringert man das äußere Magnetfeld H , so schließt sich die Anregungslücke von ϵ_2 . Ausgehend von $\epsilon_2(X_2 = 0) = 0$ findet man die Phasengrenze H1/H2, unterhalb der der Grundzustand $|\Psi_{H1}\rangle$ instabil gegenüber Spinflips wird:

$$\epsilon_2(X_2 = 0) = 0 \Leftrightarrow H_{H1/H2} = 2. \quad (3.110)$$

Die zweite Phase H2 ist durch $0 < X_2 < \infty$ definiert. Der Grundzustand $|\Psi_{H2}\rangle$ enthält eine endliche Konzentration von magnetischen Anregungen und ist daher nicht mehr ferromagnetisch geordnet. Das Bild, das man hier für die magnetischen Anregungen erhält, ist annähernd identisch mit dem für die Phase A2, d.h. für $H = H_{H1/H2} - \delta H$ ($0 < \delta H \ll 1$) findet man magnonische Anregungen. Für verschwindendes Magnetfeld H , $X_2 = \infty$ kann man (3.108) mit Hilfe einer FOURIER-Transformation exakt berechnen:

$$(\hat{1} - \hat{a}_2) * \epsilon_2(x) = -2\pi a_1(x) \Leftrightarrow \epsilon_2(x) = -2\pi p(x). \quad (3.111)$$

Man erhält das bekannte Spinonenspektrum (3.69) des isotropen Spin $S = 1/2$ -HEISENBERG Modells [12, 80].

3.2.4 Vergleich mit dem supersymmetrischen t -J-Modell

Da die dotierte Spin $S = 1$ -Kette eine Verallgemeinerung des supersymmetrischen t -J-Modells ist, sollen hier die Unterschiede und die Gemeinsamkeiten im Tieftemperaturverhalten der beiden Modelle untersucht werden. Dazu wird im folgenden das Tieftemperatur-Phasendiagramm des supersymmetrischen t -J-Modells, sowie dessen Herleitung mittels des thermodynamischen BETHE-Ansatz kurz vorgestellt. Ausgangspunkt sind die diskreten BETHE-Ansatz-Gleichungen des t -J-Modells [28, 29, 38, 68]. Wie im vorangegangenen Kapitel gesehen, besteht der einzige Unterschied darin, daß man in Gleichung (3.1) den Ausdruck $\left(\frac{\lambda_j+i}{\lambda_j-i}\right)^L$ durch $\left(\frac{\lambda_j+i/2}{\lambda_j-i/2}\right)^L$ ersetzt. Ansonsten ändert sich die Struktur der BETHE-Ansatz-Gleichungen nicht, nur die Interpretation der Rapiditäten λ_j und ν_α muß angepaßt werden, da der lokale Hilbertraum des t -J-Modells aus den drei elektronischen Zuständen $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ besteht. Der Zustand $|0\rangle$ entspricht einem Loch in einem Leitungsband aus Elektronen — Doppelbesetzung wird wegen starker *On-Site*-COULOMB-Abstoßung ausgeschlossen. Ziel ist es, daß Tieftemperaturverhalten des supersymmetrischen t -J-Modells in Abhängigkeit von der Lochkonzentration $0 \leq x_h \leq 1$ oder alternativ von der Elektronendichte $0 \leq n_e \leq 1$ mit $n_e = 1 - x_h$ zu bestimmen.

Die kleine Veränderung der BETHE-Ansatz-Gleichungen hat weitreichende Konsequenzen. Bildet man den thermodynamischen Limes mittels TAKAHASHIS *String*-Hypothese, so stellt

sich heraus, daß für das supersymmetrische t - J -Modell nur die beiden *Dressed-Energies* κ und ϵ_1 negative Werte annehmen, d.h. masselos werden können [68, 81, 82]. Die effektiven Tieftemperaturtheorien bzw. die verschiedenen Phasen lassen sich wieder aus dem Grenzfall $T = 0$ der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen bestimmen:

$$\begin{aligned}\epsilon_1(x) &= H + \epsilon_1^{(0)}(x) - \hat{a}_2 * \epsilon_2(x | \pm X_1) + \hat{a}_1 * \kappa(x | \pm X_h), \\ \kappa(x) &= -\left(\mu + \frac{H}{2}\right) + \hat{a}_1 * \epsilon_1(x | \pm X_1).\end{aligned}\quad (3.112)$$

Klassifiziert man die Tieftemperaturphasen wie oben anhand der FERMI-Punkte X_1 und X_h , so findet man für das supersymmetrische t - J -Modell fünf unterschiedliche Phasen:

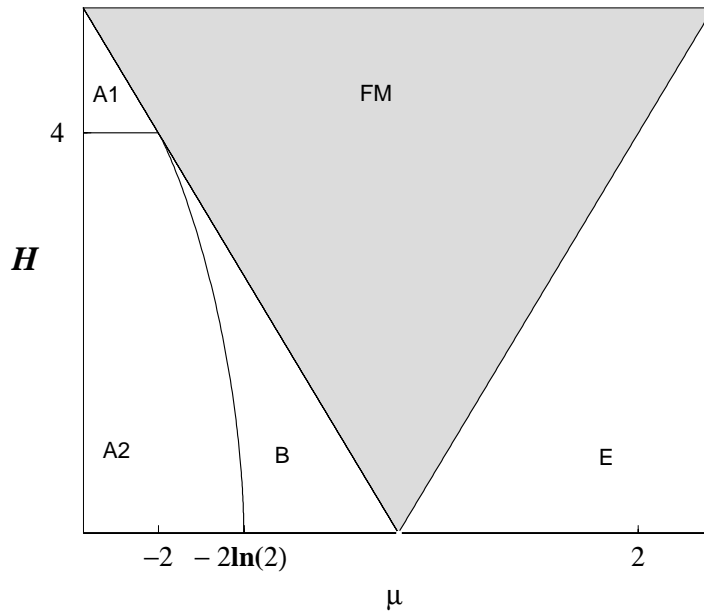


Abbildung 3.3. μ - H -Tieftemperatur-Phasendiagramm des supersymmetrischen t - J -Modells.

Phase A1_{tJ}: - Dieser Bereich wird durch die Bedingung, daß beide Moden eine Anregungslücke aufweisen, charakterisiert: $X_1 = X_h = 0$. In diesem Fall ist die Loch- und Spinflipkonzentration identisch Null. Daher entspricht der Grundzustand in dem durch $-\mu > H/2 > 2$ eingeschränkten Bereich dem ferromagnetisch geordneten, halbgefüllten Band.

Phase A2_{tJ}: In dieser Phase ist $X_h = 0$ und $0 > X_1 > \infty$, d.h. $x_h = 0$ und $0 < n_\downarrow < 1$. Da für verschwindende Lochkonzentration das supersymmetrische t - J -Modell identisch zur isotropen Spin $S = 1/2$ -HEISENBERG-Kette ist, sind die magnetischen Anregungen in der Nähe der Phasengrenze $H \simeq H_{A1tJ/A2tJ}$ Magnonen, während sie bei $H \simeq 0$ zu Spinonen werden.

Phase B_{tJ}: In diesem Bereich, $0 < X_1, X_h < \infty$, sind beide Anregungsmoden κ und ϵ_1 masselos. Das führt zu endlichen Elektronen- und Spinflipdichten für den Grundzustand. Das Tieftemperaturverhalten dieser Phase kann man daher effektiv durch eine TOMONAGA-LUTTINGER-Flüssigkeit mit der Dispersionsrelation (3.112) beschreiben.

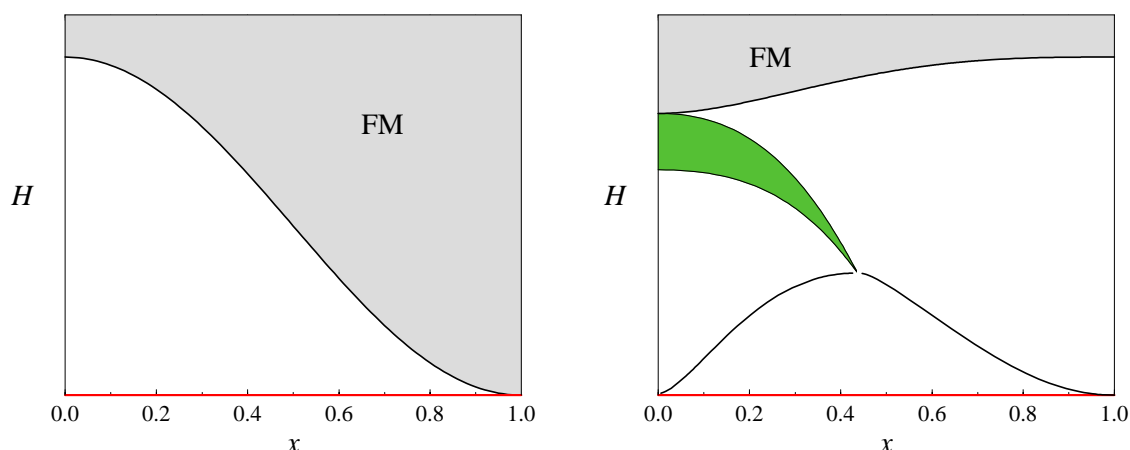


Abbildung 3.4. x_h - H -Tieftemperatur-Phasendiagramm des supersymmetrischen t - J -Modells (l) bzw. der dotierten Spin $S=1$ -Kette (r).

Phase FM_{tJ} : Der Grundzustand ist ferromagnetisch geordnet und besitzt eine endliche Elektronendichte $0 < n_e < 1$. Die linke und rechte Phasengrenze von FM werden durch die beiden Bedingungen $X_h = \infty$ und $X_h = X_1 = \infty$ definiert, entsprechend $-H/2 < \mu < H/2$.

Phase E_{tJ} : Für $\mu < H/2$ liegen wegen $X_h = X_1 = 0$ zwei vollständig gefüllte Quasiteilchenbänder vor, die eine endliche Lochanregungslücke aufweisen, gleichbedeutend mit $x_h = 1 \Leftrightarrow n_e = 0$. Der Grundzustand entspricht also dem leeren Elektronenband.

3.3 Magnetisierungsplateaus

In diesem Abschnitt sollen die thermodynamischen Eigenschaften der dotierten Spin $S=1$ -Kette in einem äußeren Magnetfeld H bei konstanter Störstellenkonzentration x_h für $T=0$ bzw. niedrige Temperaturen $T \ll 1$ näher untersucht werden. Anhand des im vorangegangenen Abschnitts abgeleiteten Tieftemperatur-Phasendiagramms sieht man, daß in den vier Phasen B1, C, B2 und FM eine endliche Störstellenkonzentration x_h aufweisen — Phase 3M wird nicht näher untersucht. Von besonderer Bedeutung in diesem Zusammenhang ist die Phase C, da das System hier neben der endlichen Störstellenkonzentration x_h auch eine endliche Spinflipkonzentration n_\downarrow aufweist. Somit ist der Grundzustand $|\Psi_C\rangle$ nicht ferromagnetisch geordnet und man erwartet ein nicht-triviales Anregungsspektrum der Ladungs- und Spinfreiheitsgrade.

In den beiden Phasen B1 und B2 sind jeweils Anregungen masselos, und das Tieftemperaturverhalten wird mit Hilfe einer zwei-komponentigen TOMONAGA-LUTTINGER-Flüssigkeit beschrieben. Im Unterschied dazu tritt in der Phase C für $T=0$ nur die masselose Mode ϵ_2 auf. Daher läßt sich hier die Tieftemperatureigenschaften der dotierten Spin $S=1$ -Kette mit Hilfe einer einzigen skalaren, linearen Integralgleichung (3.103) für ϵ_2 berechnen, die man aus den thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen mit $X_1 = 0$, $0 < X_2 < X_2^c$ und

$X_h = \infty$ erhält:

$$\epsilon_2(x) = -\mu - \frac{3}{2}H + \epsilon_2^{(0)}(x) - 2\hat{a}_2 * \epsilon_2(x|\pm X_2). \quad (3.113)$$

Die beiden FERMI-Punkte $\pm X_2$ müssen der Gleichung $\epsilon_2(\pm X_2) = 0$ genügen und sind damit eine Funktion des äußeren Magnetfeldes H und des chemischen Störstellenpotentials μ . Um die Störstellen- und Spinflipkonzentration x_h bzw. $n_\downarrow = 2n_2 - x_h$ berechnen zu können, muß man parallel zu (3.103) das Gleichungssystem für die Störstellen- und *String*-Dichten ρ bzw. σ_n lösen. Da in der Phase C alle *Dressed-Energies* $\epsilon_2 > 0$, $n \neq 2$, und $\kappa < 0$ sind, d.h. $X_n = 0$ für $n \neq 2$ und $X_h = \infty$, sieht man anhand von (3.56), daß σ_2 einer Integralgleichung ähnlich zu (3.103) genügen muß:

$$\sigma_2(x) = -\frac{1}{2\pi} \epsilon_2^{(0)}(x) - 2\hat{a}_2 * \sigma_2(x|\pm X_2). \quad (3.114)$$

Man findet, daß in der Phase C die Störstellenkonzentration x_h wegen

$$x_h = \int_{-X_h}^{+X_h} dx \rho(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-X_2}^{+X_2} dx' a_2(x-x') \sigma_2(x') = \int_{-X_2}^{+X_2} dx \sigma_2(x) \quad (3.115)$$

identisch mit der 2-*String*-Konzentration n_2 und daher auch gleich der Spinflipkonzentration $n_\downarrow = 2n_2 - x_h = x_h$ ist. Die Magnetisierung des Grundzustandes $|\Psi_C\rangle$ ist also durch $m^z = 1 - 3x_h/2$ gegeben.

Die FERMI-Punkte $\pm X_2$ hängen in dieser Phase wegen (3.103) nur von $\Gamma = -\mu + 3H/2$ ab. Aus diesem Grund ändert sich die Störstellenkonzentration x_h bzw. die Magnetisierung m^z in der gesamten Phase C nicht, solange man die Magnetfeldstärke H und das chemische Störstellenpotential μ so wählt, daß Γ konstant gehalten wird. Dies ist der Grund dafür, daß man in der Magnetisierungskurve $m^z(H)$ ein zweites Plateau mit dem Wert $m_C^z = 1 - 3x_h/2$ findet. Im Vergleich mit dem zum ferromagnetischen Grundzustand $|\Psi_{FM}\rangle$ korrespondierenden Plateau $m_{FM}^z = 1 - x_h/2$ tritt m_C^z schon bei relativ kleinen äußeren Magnetfeldern H auf. Eine Besonderheit dieses zweiten Plateaus ist es, daß der Wert der Magnetisierung $m_C^z(x_h)$ in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h kontinuierlich verändert werden kann. Bei den bisher bekannten, nicht-trivialen magnetischen Plateaus in Spinsystemen ist dies nicht möglich, da diese aufgrund von topologischen Argumenten induziert werden [48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56].

Die beiden Endpunkte $H_{B1/C}^*$ und $H_{C/B2}^*$ von $m_C^z(H)$ kann man mit Hilfe der Gleichungen (3.73) und (3.104) für die Phasengrenzen B1/C und C/B2 bestimmen. Das physikalische Verhalten der beiden masselosen, magnetischen Anregungen ϵ_1 und κ bei $H_{B1/C}$ bzw. $H_{C/B2}^*(x_h)$ mit $H_{B1/C}^*(x_h) < H < H_{C/B2}^*(x_h)$ zeigt, daß die jeweilige Anregungslücke wie $\Delta_{\epsilon_1/\kappa} \propto |H - H_i^*(x_h)|$ für $H \rightarrow H_i^*(x_h)$ gegen Null geht, $i = B1/C, C/B2$, siehe Abbildung (3.5).

Eine weitere Anomalie dieses Plateaus ist, daß die Magnetisierungskurve $m^z(H)$ in der Nähe der Phasenübergänge B1/C und C/B2 nicht das typische Wurzelverhalten $m^z(H) = |H - H_i|^\alpha$ mit $i = B1/C, C/B2$ und $\alpha = 1/2$ aufweist, das man bei einem Übergang von einem kommensurablen zu einem inkommensurablen Verhalten erwartet [48, 83]. Die numerische Verifikation des Wertes von α ist im allgemeinen schwierig, auch wenn es sich bei

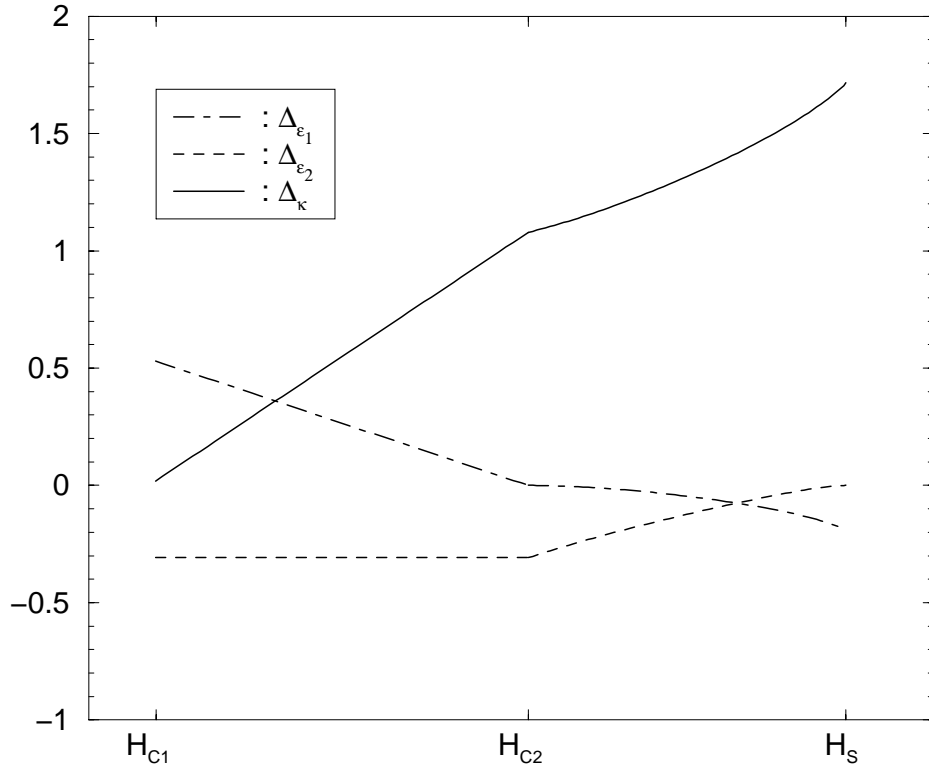


Abbildung 3.5. Loch- und Quasiteilchenanregungslücke $\Delta_{\kappa} = -\kappa(\infty)$ bzw. $\Delta_1 = \epsilon_1(0)$ bei einer Störstellenkonzentration von $x_h = 0.2$ in der Plateau-phase C und der Tomonaga-Luttinger-Phase B2.

dem hier betrachteten Modell um ein exakt lösbares handelt, da solche Phasenübergänge meistens damit verbunden sind, daß einer oder mehrere FERMI-Seen ϵ_i vollständig aufgefüllt werden, d.h. die korrespondierenden FERMI-Punkte X_i^{\pm} gegen Unendlich gehen. Für die dotierte Spin $S=1$ -Kette tritt dieses Problem jedoch nur an der Phasengrenze B1/C, $X_h \rightarrow \infty$ auf, während C/B2 gleichbedeutend mit $X_1 = 0$ ist. Im Rahmen der numerischen Genauigkeit der Rechnungen zeigt die Magnetisierungskurve $m^z(H)$ bei B1/C ein kritisches Verhalten $\propto |H_{B1/C}^*(x_h) - H|^{\alpha}$ mit $\alpha \simeq 1/2$. Dies entspricht ungefähr dem erwarteten Verhalten. In der Nähe des Übergangs C/B2 sieht man jedoch, daß sich die Magnetisierung $m^z(H)$ eindeutig linear mit dem äußeren Magnetfeld ändert, $\Delta m^z(H) \propto |H - H_{C/B2}^*(x_h)|$. Für kleine Störstellenkonzentrationen x_h läßt sich das Verhalten von $m^z(H)$ bei C/B2 näherungsweise analytisch bestimmen. Dazu muß man zunächst analog zum Vorgehen in den Phasen A2 und FM die rechte Seite der thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.93) bis zur zweiten Ordnung in x entwickeln, mit $\mathcal{O}(x) = \mathcal{O}(X_1) = \mathcal{O}(X_2)$. Wegen $\epsilon_1(X_1) = 0$ und $\epsilon_2(X_2) = 0$ findet man, daß das äußere Magnetfeld H und das chemische Potential μ mit den zwei FERMI-Punkten X_1 und X_2 wie folgt zusammenhängen:

$$\begin{aligned} -\mu + \frac{1}{2}H &= \Gamma_1 = 2 - 2X_1^2 + \mathcal{O}(x^3), \\ -\mu + \frac{3}{2}H &= \Gamma_2 = \frac{16}{3} - \frac{448}{27}X_2^2 + \mathcal{O}(x^3). \end{aligned} \quad (3.116)$$

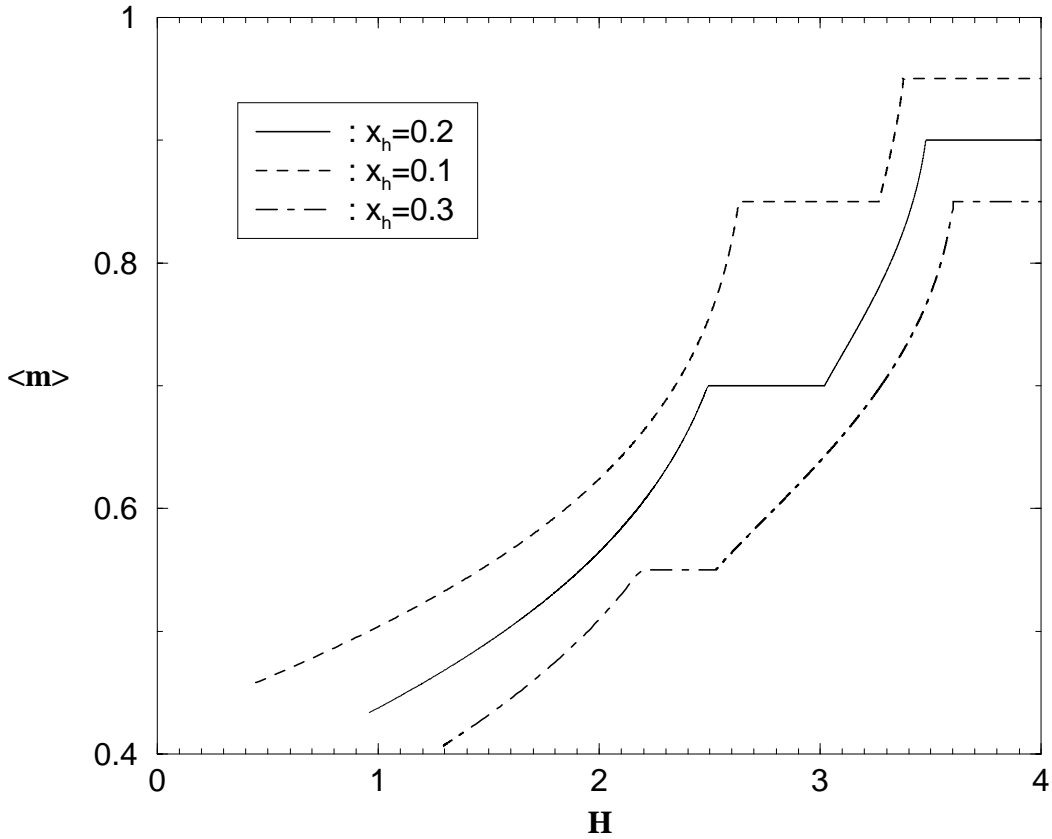


Abbildung 3.6. Magnetisierungskurve der dotierten Spin $S=1$ -Kette für verschiedene Störstellenkonzentration x_h vs. äußeres Magnetfeld H bei $T=0$. Dabei werden von links nach rechts die Phasen B1, C, B2 und FM durchlaufen.

Mittels dieser Ergebnisse lassen sich die beiden Anregungsmoden ϵ_1 und ϵ_2 schreiben als:

$$\epsilon_1(x) = 2(x^2 - X_1^2) + \mathcal{O}(x^3) \quad \text{bzw.} \quad \epsilon_2(x) = \frac{448}{27}(x^2 - X_2^2) + \mathcal{O}(x^3). \quad (3.117)$$

Ferner muß man auch die Gleichungen (3.56) für die *String*-Dichten σ_1 und σ_2 bis zur zweiten Ordnung in x entwickeln, um damit die entsprechenden *String*-Konzentrationen n_1 und n_2 bestimmen zu können:

$$\begin{aligned} \sigma_1(x) &= \frac{1}{\pi} - \frac{32}{3\pi^2}X_2 + \frac{16}{\pi^3}X_1X_2 + \frac{128}{3\pi^3}X_2^2 - \frac{1}{\pi}x^2 + \mathcal{O}(x^3), \\ \sigma_2(x) &= \frac{8}{3\pi} + \frac{4}{\pi}X_1 - \frac{32}{3\pi^2}X_2 + \frac{176}{3\pi^3}X_1X_2 + \frac{128}{3\pi^3}X_2^2 - \frac{224}{27\pi}x^2 + \mathcal{O}(x^3). \end{aligned} \quad (3.118)$$

Man erhält:

$$\begin{aligned} n_1 &= n_1(X_1, X_2) = \int_{-X_1}^{+X_1} dx \sigma_1(x) = \frac{2}{\pi}X_1 \left(1 - \frac{32}{3\pi}X_2 \right) + \mathcal{O}(x^3), \\ n_2 &= n_2(X_1, X_2) = \int_{-X_2}^{+X_2} dx \sigma_2(x) = \frac{8}{3\pi}X_2 \left(2 - \frac{3}{\pi}X_1 - \frac{8}{\pi}X_2 \right) + \mathcal{O}(x^3). \end{aligned} \quad (3.119)$$

In der Phase B2 ist die Störstellenkonzentration x_h aufgrund von (3.56) und (3.57) sowie $X_h = \infty$ durch $x_h = x_h(X_1, X_2) = n_1(X_1, X_2) + n_2(X_1, X_2)$ gegeben. Da man sich für den Verlauf der Magnetisierungskurve m^z in Abhängigkeit von H bei konstant gehaltener Störstellenkonzentration x_h interessiert, läßt sich durch Invertierung von (3.119) der FERMI-Punkt X_2 als Funktion von x_h und X_1 schreiben:

$$X_2 = X_2(x_h, X_1) = \frac{3\pi}{16}x_h \left(1 + \frac{3}{4}x_h\right) - \frac{3}{8}X_1 \left(1 - \frac{5}{4}x_h + \frac{4}{\pi}X_1\right) + \mathcal{O}(x^3). \quad (3.120)$$

Für die Magnetisierung des Systems ergibt sich:

$$m^z = m^z(x_h, X_1) = 1 + \frac{1}{2}x_h - n_1 - 2n_2 = 1 - \frac{3}{2}x_h + n_1(x_h, X_1). \quad (3.121)$$

Mit (3.119) und (3.120) erhält man für die 1-String-Konzentration $n_1(x_h, X_1)$ als Zwischenergebnis:

$$n_1(x_h, X_1) = \frac{2}{\pi}X_1 \left(1 - 2x_h + \frac{4}{\pi}X_1\right) + \mathcal{O}(x^3). \quad (3.122)$$

Der nächste Schritt besteht darin, ausgehend von der aus (3.116) abgeleiteten Gleichung

$$\begin{aligned} H &= H(x_h, X_1) \\ &= \Gamma_2(X_1, X_2(x_h, X_1)) - \Gamma_1(X_1, X_2(x_h, X_1)) \\ &= H_{C/B2}(x_h) + \Delta H(x_h, X_1) \\ &= \frac{10}{3} - \frac{7\pi^2}{12}x_h^2 + X_1 \left(\frac{7\pi}{3}x_h - \frac{1}{3}X_1\right) + \mathcal{O}(x^3), \end{aligned} \quad (3.123)$$

den FERMI-Punkt X_1 in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h und der Abweichung ΔH von der Phasengrenze C/B2 auszudrücken. Dazu muß man die folgende quadratische Gleichung lösen:

$$\Delta H = X_1 \left(\frac{7\pi}{3}x_h - \frac{1}{3}X_1\right) \Leftrightarrow X_1^2 - 7\pi x_h X_1 + 3\Delta H = 0. \quad (3.124)$$

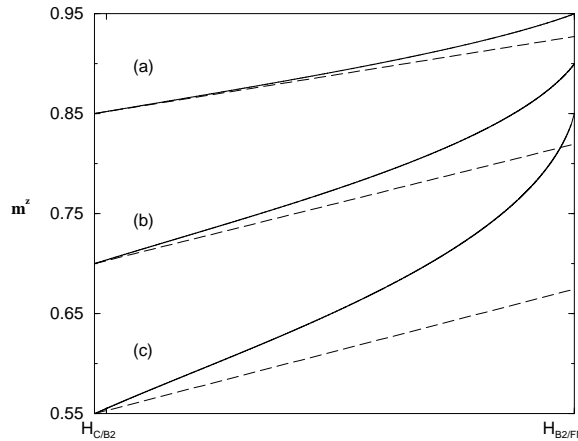
Der FERMI-Punkt X_1 ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} X_1(x_h, \Delta H) &= \frac{7\pi}{2}x_h \left(1^{(+)} - \sqrt{1 - \frac{12}{49\pi^2} \frac{\Delta H}{x_h^2}}\right) \\ &\simeq \frac{7\pi}{2}x_h \left\{ \frac{6}{49\pi^2} \frac{\Delta H}{x_h^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{6}{49\pi^2} \frac{\Delta H}{x_h^2}\right)^2 \right\}, \quad \frac{12}{49\pi^2} \frac{\Delta H}{x_h^2} \ll 1. \end{aligned} \quad (3.125)$$

$$(3.126)$$

Die (+)-Lösung der obigen Gleichung ist unphysikalisch, da für $\Delta H \rightarrow 0$ auch X_1 verschwinden soll. Anhand dieses Ergebnisses sieht man, daß sich die Magnetisierungskurve $m^z(H)$ in der Nähe der Phasengrenze C/B2 für kleine Störstellenkonzentrationen x_h tatsächlich linear mit ΔH ändert, vgl. Abbildung (3.7):

$$m^z(H_{C/B2} + \Delta H) = m_C^z(x_h) + \frac{6}{7\pi^2} \left(\frac{1}{x_h} - 2\right) \Delta H + \mathcal{O}(\Delta H^2). \quad (3.127)$$



Abbildungung 3.7. Magnetisierungskurve m^z der dotierten Spin $S = 1$ -Kette in der Phase B2 vs. äußeres Magnetfeld H für unterschiedliche Störstellenkonzentrationen $x_h = 0.1$ (a), 0.2 (b) und 0.3 (c). Die durchgezogenen Linien sind die exakten numerischen Ergebnisse, während die gestrichelten mittels Gleichung (3.127) berechnet wurden.

Das unterschiedliche, singuläre Verhalten der Magnetisierung $m^z(H)$ in der Nähe der beiden kritischen Endpunkte $H_{B1/C}^*(x_h)$ und $H_{C/B2}^*(x_h)$ läßt sich damit erklären, daß die beiden jeweiligen masselosen Anregungsmoden ϵ_1 und κ in Phase B1 bzw. ϵ_1 und ϵ_2 in Phase B2 nicht unabhängig voneinander sind, sondern miteinander wechselwirken. In Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes H ist die dotierte Spin $S = 1$ -Kette $SU(2)$ invariant, und man kann die zwei Moden aufgrund ihrer unterschiedlichen Symmetrieeigenschaften als Spin- bzw. Ladungsanregungen identifizieren. Betrachtet man das System in einem endlichen Magnetfeld H , so geht diese eindeutige Zuordnung durch die Brechung der $SU(2)$ -Invarianz verloren. Man erhält stattdessen eine magnetfeldabhängige Mischung der beiden Sektoren — ein Phänomen das bereits aus der Analyse des HUBBARD-Modells bekannt ist [14]. Dort findet man, daß die beiden masselosen Moden nur in bestimmten Grenzfällen von H entkoppeln. Die bosonische Mode, die bei $H = 0$ mit den Ladungsfreiheitsgraden assoziiert wird, ändert in Abhängigkeit von H nur ihren konformen Radius R , während für $H = 0$ die magnetischen Anregungen $S = 1/2$ -Spinonen, für genügend große Magnetfelder $H \gg H_c$ aber $S = 1$ -Magnonen sind.

Will man das thermodynamische Verhalten wie etwa die Magnetisierungskurve m^z oder die magnetische Suszeptibilität χ bei endlichen Temperaturen T berechnen, so muß man die thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.45) und (3.52) lösen, ein im allgemeinen unmögliches Unterfangen. In genügend starken, äußeren Magnetfeldern $H \gg T$ sind jedoch alle Anregungsmoden ϵ_n mit $n \neq 1, 2$ massiv und können deshalb aus den beiden Gleichungen (3.45) und (3.52) eliminiert werden. Mit dieser Näherung ergibt sich ein System von drei gekoppelten nichtlinearen Integralgleichungen für die verbleibenden Moden ϵ_1 , ϵ_2 und κ , das sich numerisch lösen läßt. Zur Berechnung der Magnetisierung $m^z(H, T)$ sowie der magnetischen Suszeptibilität $\chi(H, T)$ bei konstanter Störstellenkonzentration x_h muß man das großkanonische Potential $\Omega(T, x_h, H) = F(T, \mu, H) + \mu x_h$ verwenden, da bei gegebenem H das chemische Potential μ gerade so wählt wird, daß die Störstellenkon-

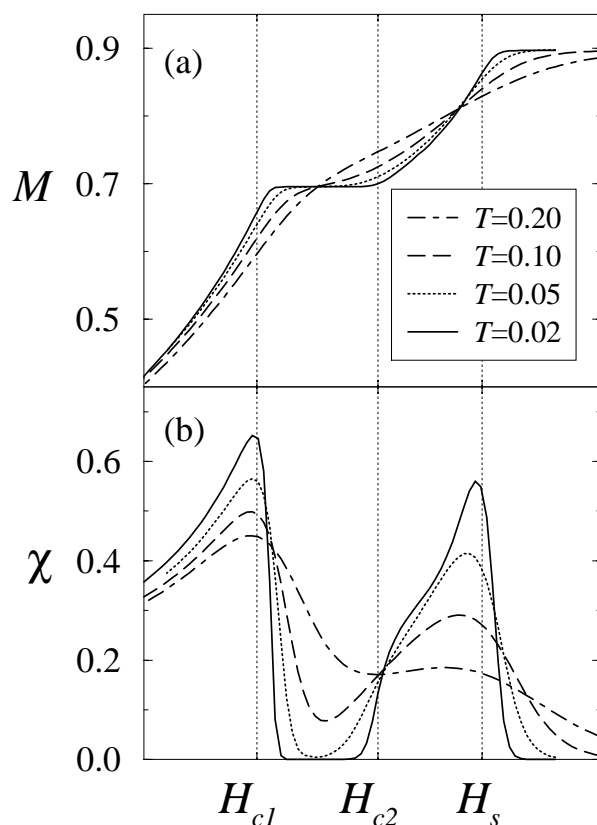


Abbildung 3.8. Magnetisierungskurve (a) und Suszeptibilität (b) der dotierten Spin $S=1$ -Kette für eine Störstellenkonzentration von $x_h = 0.2$ bei unterschiedlich tiefen Temperaturen T vs. äußeres Magnetfeld H . Man sieht, wie sich mit sinkenden Temperaturen die Magnetisierungsplateaus langsam ausbilden und wie die Suszeptibilität an den Phasenübergängen Singularitäten entwickelt.

zentration $x_h = \partial_\mu F$ konstant bleibt. In Abbildung (3.8) sind die Ergebnisse aufgetragen, die man für $x_h = 0.2$ und verschiedene Temperaturen T für die Magnetisierung m^z bzw. die magnetische Suszeptibilität χ erhält. Man erkennt eindeutig, daß sich die beiden Plateaus bei $m_C^z = 1 - 3x_h/2$ bzw. $m_{FM}^z = 1 - x_h/2$ mit sinkender Temperatur T beginnen auszubilden und die Suszeptibilität in der Nähe der Phasengrenzen B1/C, C/B2 und B2/FM entsprechende Singularitäten entwickelt, was auf einen kontinuierlichen Phasenübergang schließen läßt.

KAPITEL 4

Dynamische Tieftemperatureigenschaften des integrierbaren Modells

In diesem Kapitel sollen bei tiefen Temperaturen T die dynamischen Eigenschaften der dotierten Spin $S = 1$ -Kette in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld H und der Störstellenkonzentration x_h untersucht werden. Besonders interessant sind die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in den beiden TOMONAGA-LUTTINGER-Phasen B1 und B2 sowie in der Plateauphase C. Dies ermöglicht es, den physikalischen Mechanismus, der zu der Ausbildung des Magnetisierungsplateaus bei $m_C^z = 1 - 3x_h/2$ führt und die damit verbundenen Phasenübergänge B1/C und C/B2, besser zu verstehen.

Wie bereits erwähnt wurde, ist es im Rahmen des von M. TAKAHASHI sowie C.N. und C.P. YANG entwickelten thermodynamischen BETHE-Ansatzes nur möglich, statische thermodynamische Größen zu berechnen, nicht jedoch Korrelationsfunktionen, da die explizite Form der BETHE-Ansatz-Eigenzustände nicht bekannt ist. Erst Mitte der achtziger bzw. Anfang der neunziger Jahre wurden zwei unterschiedliche Methoden entwickelt, mit denen dies prinzipiell erreicht werden kann: Zum einen das Konzept der Formfaktoren, zum anderen ein auf konformer Feldtheorie und *Finite-Size-Scaling* basierendes Verfahren [15].

Die Grundlage der von V.E. KOREPIN *et al.* eingeführten Formfaktormethode besteht darin, daß zeit- und temperaturabhängige Korrelationsfunktionen von exakt lösbaren Modellen als Determinanten eines bestimmten Typus von Integraloperatoren, sogenannten FREDHOLM-Operatoren, dargestellt werden können [84, 15]. Diese Determinantendarstellung erlaubt es einem, ein System von nichtlinearen Differentialgleichungen für die gesuchten Korrelatoren des quantenmechanischen Problems abzuleiten, das sehr stark den EULER-LAGRANGE-Gleichungen bzw. den HAMILTONschen Bewegungsgleichungen ähnelt, die man normalerweise für das korrespondierende klassische System erhält. Mit diesem so gewonnenen Differentialgleichungssystem läßt sich das Verhalten der Korrelationsfunktionen auf beliebigen Längenskalen und für beliebige Temperaturen T studieren. Die Untersuchung der Korrelatoren für große Zeiten und Abstände, der physikalisch interessante Grenzfall, bedarf bei dieser Methode allerdings einigen Aufwands. Ausgehend von dem Differentialgleichungssystem für die Korrelationsfunktionen muß zunächst das dazu korrespondierende Integro-Differentialgleichungssystem gebildet werden, dessen Lösung auf ein matrixwertiges RIEMANN-HILBERT-Problem führt.

Der große Vorteil der zweiten auf konformer Feldtheorie und *Finite-Size-Scaling* basierenden Methode ist, daß sich das oben erwähnte asymptotische Verhalten der Korrelatoren im Rahmen dieses Zugangs relativ einfach bestimmen läßt [6, 34, 35, 36, 37]. Der Grund hierfür ist, daß eindimensionale Quantensysteme, deren niederenergetisches Spektrum masselos ist, bei $T = 0$ ein kritisches Verhalten aufweisen. In Abhängigkeit von äußeren Kon-

trollparametern, wie z.B. Magnetfeld H oder Störstellenkonzentration x_h , kann das System verschiedene kontinuierliche Phasenübergänge durchlaufen, die mathematisch durch eine divergierende Korrelationslänge ξ charakterisiert sind. Dazu gleichbedeutend ist, daß für $T = 0$ die Theorie skaleninvariant wird, d.h. die Korrelationsfunktionen zerfallen nur noch algebraisch und nicht mehr exponentiell mit dem Abstand. In den siebziger Jahren konnte A.M. POLYAKOV zeigen, daß eine lokale Feldtheorie, die invariant unter Skalentransformationen ist, sogar invariant unter allen konformen Abbildungen ist. Daher kann man das Verhalten eines kritischen Systems im Rahmen einer konformen Feldtheorie beschreiben [85].

Da in der Nähe eines kontinuierlichen Phasenübergangs die mikroskopischen Eigenschaften des jeweiligen Modells unwichtig für das Skalenverhalten sind, kann man jedes System einer sogenannten Universalitätsklasse zuordnen [86]. Diese korrespondieren wiederum zu einer bestimmten konformen Feldtheorie. In (1+1) Raumzeit-Dimensionen ist jede konforme Feldtheorie durch die zentrale Ladung c der zugrundeliegenden VIRASORO-Algebra sowie den zugehörigen Feldinhalt eindeutig bestimmt. Die kritischen Exponenten, die den algebraischen Zerfall der Korrelationsfunktionen determinieren, hängen unmittelbar mit den Skalendimensionen der entsprechenden Feldoperatoren zusammen [6].

Die *Finite-Size*-Korrekturen der Grundzustandsenergie sowie des niederenergetischen Anregungsspektrum ermöglichen es einem, sowohl die zentrale Ladung als auch die Skalendimensionen zu berechnen [35, 34, 36, 37]. Die führenden Abweichungen des Tieftemperaturspektrums bei einem endlichen System der Länge $L \gg 1$ im Vergleich zu dem unendlich großen System kann man drei unterschiedlichen physikalischen Prozessen zuordnen: Zum einen gibt es Teilchen-Lochanregungen in der Nähe der jeweiligen FERMI-Punkte. Zweitens kann sich die Quasiteilchendichte bei niederenergetischen Anregungen verändern und drittens müssen die FERMI-Seen nicht mehr symmetrisch sein, d.h. $\epsilon_\alpha(X_\alpha^\pm) = 0$ aber $X_\alpha^+ \neq X_\alpha^-$ [87, 15].

Das Kapitel ist wie folgt aufgebaut: Zuerst wird eine kurze Einführung in die Grundlagen der konformen Feldtheorie gegeben, soweit dies zum Verständnis des weiteren Verlaufes nötig und sinnvoll ist. Danach werden die *Finite-Size*-Korrekturen für das niederenergetische Anregungsspektrums der dotierten Spin $S = 1$ -Kette ausgehend von den logarithmischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.25) mit Hilfe der EULER-MACLAURIN-Summenformel berechnet. Im dritten Teil des Kapitels werden dann die Ergebnisse für die unterschiedlichen Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h und des äußeren Magnetfeldes H in den beiden TOMONAGA-LUTTINGER-Phasen B1 und B2 sowie in den Plateauphasen C dargestellt.

4.1 Konforme Feldtheorie

A.A. BELAVIN, A.M. POLYAKOV und A.B. ZAMOLODCHIKOV veröffentlichten im Jahre 1984 ihre grundlegende Arbeit, in der sie zum ersten Mal den Zusammenhang zwischen kritischen Phänomenen in (1+1) dimensional Systemen und konformer Feldtheorie herstellten und somit eine neuartige und mächtige Methode zur Berechnung von kritischen Modellen einführten. Weiterführende und umfassendere Darstellungen dieses Zugangs findet man heutzutage in vielen Review-Artikeln und Lehrbüchern [4, 88, 6, 5].

4.1.1 Kritisches Verhalten und Skaleninvarianz

Ein Phasenübergang zweiter Ordnung wird dadurch charakterisiert, daß sich das thermodynamische Potential in Abhängigkeit von den äußeren Parametern wie z.B. Temperatur T oder Magnetfeld H kontinuierlich verändert, während die entsprechenden Suszeptibilitäten ein singuläres Verhalten aufweisen. Formal kann man einen kritischen Punkt dadurch definieren, daß die Korrelationslänge ξ des Systems, die normalerweise die typische Distanz für die statistischen Korrelationen des Ordnungsparameters angibt, divergiert. Dies bedeutet, daß für das System keine natürliche Längenskala existiert und es somit invariant unter Skalentransformationen ist. Eine weitere bemerkenswerte Eigenschaft von kritischen Punkten ist, daß wegen der Skaleninvarianz Unterschiede einzelner Modelle auf der mikroskopischen Ebene weitgehend unbedeutend für das kritische Verhalten sind. Somit macht es Sinn sogenannte Universalitätsklassen einzuführen, die alle Modelle mit demselben kritischen Verhalten umfassen. Die Universalitätsklassen unterscheiden sich voneinander nur durch die Dimension der Raumzeit und die zugrundeliegenden Symmetrie [86].

Die Skaleninvarianz des Systems erlaubt es, eine Feldtheorie für den Ordnungsparameter Φ aufzustellen, die nur dann invariant unter globalen Skalentransformationen

$$x^\mu \rightarrow \Lambda x^\mu \quad (4.1)$$

ist, wenn das Feld Φ unter (4.1) wie

$$\Phi(x) \rightarrow \Lambda^\Delta \Phi(x) \quad (4.2)$$

transformiert, wobei Δ die sogenannte Skalendimension von Φ ist. Dies ist äquivalent zu der Forderung, daß der Energie-Impuls-Tensor T der Feldtheorie spurfrei ist:

$$T_\mu^\mu(x) = 0. \quad (4.3)$$

In den siebziger Jahren zeigte A.M. POLYAKOV in [85], daß die Bedingung (4.3) in lokalen Feldtheorien nicht nur für Skalentransformationen sondern auch für alle konformen Abbildungen

$$x^\mu \rightarrow \Lambda x^\mu : g_{\mu\nu}(x) \rightarrow \frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu} \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\nu} g_{\alpha\beta}(x) = \rho(\Lambda) g_{\mu\nu}(x) \quad (4.4)$$

erfüllt ist, d.h. für alle Transformationen, die den metrischen Tensor $g_{\mu\nu}(x)$ bis auf eine mögliche Skalierung invariant lassen. Aus diesem Grund kann man jeder Universalitätsklasse eine konforme Feldtheorie eindeutig zuordnen, d.h. eine Quantenfeldtheorie, die invariant unter (4.4) ist.

4.1.2 Die konforme Gruppe

In diesem Abschnitt sollen zunächst die wichtigsten Eigenschaften der konformen Gruppe \mathcal{G} aufgeführt werden. Eine infinitesimale Koordinatentransformation

$$x^\mu \rightarrow x^\mu + \epsilon^\mu(x) \quad \text{bzw.} \quad g_{\mu\nu} \rightarrow g_{\mu\nu} - (\partial_\mu \epsilon_\nu + \partial_\nu \epsilon_\mu) \quad (4.5)$$

ist nur dann ein Element der konformen Gruppe \mathcal{G} , wenn

$$\partial_\mu \epsilon_\nu + \partial_\nu \epsilon_\mu = f(x) g_{\mu\nu} \quad \text{mit} \quad f(x) = \frac{2}{d} \partial_\mu \epsilon^\mu \quad (4.6)$$

bzw.

$$(2-d) \partial_\mu \partial_\nu f = \eta_{\mu\nu} \partial^2 f \Rightarrow (d-1) \partial^2 f = 0 \quad (4.7)$$

gilt, wobei d die Dimension der euklidischen Raumzeit ist, also $g_{\mu\nu}(x) = \eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, \dots, 1)$.

Für $d > 2$ ist die konforme Gruppe \mathcal{G} endlich dimensional und besteht aus vier unterschiedlichen Abbildungen:

$$\begin{aligned} \text{Translation} & : x^\mu \rightarrow x^\mu + a^\mu \\ \text{Dilatation} & : x^\mu \rightarrow \Lambda x^\mu \\ \text{Rotation} & : x^\mu \rightarrow \Lambda^\mu_\nu x^\nu \\ \text{Spez. Konf. Trafo.} & : x^\mu \rightarrow (x^\mu - b^\mu x^2)/(1 - 2bx + b^2 x^2). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Untersucht man die Kommutatorrelationen der dazugehörigen Generatoren, so findet man, daß die konforme Gruppe \mathcal{G} in d Dimensionen isomorph zu $SO(d+1, 1)$ ist und daher $[(d+1)(d+2)]/2$ freie Parameter besitzt.

Dagegen ist in zwei Raumzeit-Dimensionen die konforme Gruppe \mathcal{G} unendlich dimensional: Neben den sechs global konformen Abbildungen der $SO(3, 1)$ – Translation, Dilatation, Rotation und spezielle konforme Transformationen (SCT) – existieren unendlich viele lokal konforme Koordinatentransformationen. Für das weitere Vorgehen erweist es sich als besonders hilfreich die komplexe Variablen z und \bar{z} einzuführen:

$$\begin{aligned} z &= x^0 + ix^1, \quad \bar{z} = x^0 - ix^1, \\ \partial \equiv \partial_z &= \frac{1}{2}(\partial_0 - i\partial_1), \quad \bar{\partial} \equiv \partial_{\bar{z}} = \frac{1}{2}(\partial_0 + i\partial_1). \end{aligned} \quad (4.9)$$

z und \bar{z} werden zunächst als zwei voneinander unabhängige komplexe Koordinaten betrachtet. Den physikalisch relevanten Grenzfall der euklidischen Raumzeit erhält man, indem man in den Ergebnissen \bar{z} durch z^* ersetzt.

In zwei Dimensionen besteht die konforme Gruppe \mathcal{G} aus allen sogenannten (formal) holomorphen bzw. (formal) antiholomorphen Transformationen

$$z \rightarrow w(z) \quad \text{und} \quad \bar{z} \rightarrow \bar{w}(\bar{z}) \quad \text{mit} \quad \bar{\partial}w = \partial\bar{w} = 0, \quad (4.10)$$

d.h. aus allen analytischen Funktionen der Variablen z bzw. \bar{z} . Daher läßt sich \mathcal{G} als direktes Produkt $\mathcal{G} = \Gamma \otimes \bar{\Gamma}$ schreiben, wobei Γ und $\bar{\Gamma}$ zwei zueinander isomorphe Gruppen sind. Dementsprechend ist es für die Strukturbestimmung von \mathcal{G} ausreichend, im weiteren Verlauf nur den (formal) holomorphen Anteil Γ von \mathcal{G} zu untersuchen. Betrachtet man eine beliebige infinitesimale Koordinatentransformation von z

$$z \rightarrow z + \epsilon(z), \quad (4.11)$$

so sieht man, daß (4.11) genau dann zu Γ gehört, wenn $\epsilon(z)$ eine analytische Funktion in z ist. Dies bedeutet, daß $\epsilon(z)$ um $z = 0$ in eine LAURENT-Reihe entwickelbar ist:

$$\epsilon(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_n z^{n+1}. \quad (4.12)$$

Ein skalares Feld $\Phi(z, \bar{z})$ transformiert sich unter (4.11), einschließlich des antiholomorphen Anteils, daher wie

$$\begin{aligned} \Phi'(z', \bar{z}') &= \Phi(z, \bar{z}) \\ &= \Phi(z', \bar{z}') - \epsilon(z') \partial' \Phi(z', \bar{z}') - \bar{\epsilon}(\bar{z}') \bar{\partial}' \Phi(z', \bar{z}'), \end{aligned} \quad (4.13)$$

bzw. infinitesimal

$$\begin{aligned} \delta \Phi(z, \bar{z}) &= \Phi'(z, \bar{z}) - \Phi(z, \bar{z}) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{-\epsilon_n z^{n+1} \partial - \bar{\epsilon}_n \bar{z}^{n+1} \bar{\partial}\} \Phi(z, \bar{z}). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Die Generatoren der Gruppe \mathcal{G} lassen sich nun direkt ablesen:

$$l_n = -z^{n+1} \partial \quad \text{und} \quad \bar{l}_n = -\bar{z}^{n+1} \bar{\partial}. \quad (4.15)$$

Sie erfüllen die Kommutatorrelationen der WITT-Algebra:

$$\begin{aligned} [l_n, l_m] &= (n - m) l_{n+m}, \\ [\bar{l}_n, \bar{l}_m] &= (n - m) \bar{l}_{n+m}, \\ [l_n, \bar{l}_m] &= 0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Offensichtlich bilden die drei Generatoren l_{-1} , l_0 und l_1 bzw. \bar{l}_{-1} , \bar{l}_0 und \bar{l}_1 jeweils eine endlich dimensionale zur $su(2)$ isomorphe Unter algebra, die die global konformen Abbildungen auf \mathbb{C}^2 erzeugen. Ausgehend von der Definition der Generatoren findet man, daß $l_{-1} = -\partial$ Translationen, $l_0 = -z\partial$ Rotationen und Skalentransformationen und $l_1 = -z^2\partial$ spezielle konforme Abbildungen generiert. Setzt man $\bar{z} = z^*$, so muß man die jeweiligen Linearkombinationen

$$l_n + \bar{l}_n \quad \text{und} \quad i(l_n - \bar{l}_n) \quad (4.17)$$

bilden, da nur diese die reellen Achsen x^0 und x^1 invariant lassen. Insbesondere erzeugt dann $l_0 + \bar{l}_0$ die Skalentransformationen und $i(l_0 - \bar{l}_0)$ die Rotationen.

4.1.3 Primäre Felder und Korrelationsfunktionen

In diesem Abschnitt soll das Transformationsverhalten von Feldern mit beliebigen Skalendimensionen und konformen Spins unter konformen Abbildungen, sowie deren Korrelationsfunktionen in $d = 2$ Dimensionen untersucht werden. Für ein allgemeines Feld $\Phi_i(z, \bar{z})$

mit konformen Spin s_i und Skalendimension d_i kann man die dazugehörige holomorphe bzw. antiholomorphe konforme Dimension Δ_i bzw. $\bar{\Delta}_i$ wie folgt definieren:

$$\Delta_i = \frac{1}{2}(d_i + s_i) \quad , \quad \bar{\Delta}_i = \frac{1}{2}(d_i - s_i) . \quad (4.18)$$

Falls ein solches Feld $\Phi_i(z, \bar{z})$ unter beliebigen konformen Abbildungen $z \rightarrow w(z)$ und $\bar{z} \rightarrow \bar{w}(\bar{z})$ wie

$$\Phi_i(z, \bar{z}) \rightarrow \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^{\Delta_i} \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{z}} \right)^{\bar{\Delta}_i} \Phi_i(z, \bar{z}) \quad (4.19)$$

transformiert, nennt man es ein primäres Feld. Gilt das Transformationsverhalten (4.19) für die global konformen Abbildungen, so spricht man von einem quasi-primären Feld. Alle nicht quasi-primären Felder bezeichnet man als sekundäre Felder.

Die Besonderheit von quasi-primären Feldern besteht darin, daß in $d = 2$ die Korrelationsfunktionen dieser Felder relativ einfach berechnet werden können. Ausgehend von der Forderung der konformen Invarianz der Theorie erhält man für die 2- und 3-Punktfunktionen quasi-primärer Felder die folgenden Ergebnisse:

$$\langle \Phi_1(z_1, \bar{z}_1) \Phi_2(z_2, \bar{z}_2) \rangle = C_{12} z_{12}^{-2\Delta} \bar{z}_{12}^{-2\bar{\Delta}} \left\{ \begin{array}{l} \Delta_1 = \Delta_2 = \Delta \\ \bar{\Delta}_1 = \bar{\Delta}_2 = \bar{\Delta} \end{array} \right. , \text{ mit } z_{ij} = z_i - z_j, \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_1(z_1, \bar{z}_1) \Phi_2(z_2, \bar{z}_2) \Phi_3(z_3, \bar{z}_3) \rangle &= C_{123} z_{12}^{\Delta_3 - \Delta_1 - \Delta_2} z_{13}^{\Delta_2 - \Delta_1 - \Delta_3} z_{23}^{\Delta_1 - \Delta_2 - \Delta_3} \\ &\times \bar{z}_{12}^{\bar{\Delta}_3 - \bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2} \bar{z}_{13}^{\bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_3} \bar{z}_{23}^{\bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_3} . \end{aligned} \quad (4.21)$$

Höhere n -Punktfunktionen können nicht mehr so einfach bestimmt werden, da es für vier oder mehrere Punkte möglich ist, konform invariante Verhältnisse zu konstruieren, wie z.B. $z_{12}z_{34}/z_{13}z_{24}$ oder $z_{12}z_{34}/z_{23}z_{14}$. Diese Verhältnisse bezeichnet man auch als *Anharmonic-Ratios* oder *Cross-Ratios* [5, 6]. So gibt es im allgemeinen für vier verschiedene Punkte sechs unterschiedliche *Cross-Ratios*, von denen in zwei Dimensionen aber nur eines unabhängig gewählt werden kann:

$$\eta = \frac{z_{12}z_{34}}{z_{13}z_{24}} , \quad 1 - \eta = \frac{z_{14}z_{23}}{z_{13}z_{24}} , \quad \frac{\eta}{1 - \eta} = \frac{z_{12}z_{34}}{z_{23}z_{14}} . \quad (4.22)$$

Die 4-Punktkorrelationsfunktion läßt sich damit wie folgt schreiben

$$\langle \Phi_1(z_1, \bar{z}_1) \dots \Phi_4(z_4, \bar{z}_4) \rangle = C(\eta, \bar{\eta}) \prod_{i < j}^4 z_{ij}^{\Delta/3 - \Delta_i - \Delta_j} \bar{z}_{ij}^{\bar{\Delta}/3 - \bar{\Delta}_i - \bar{\Delta}_j} , \quad (4.23)$$

wobei $\Delta = \sum_{i=1}^4 \Delta_i$ bzw. $\bar{\Delta} = \sum_{i=1}^4 \bar{\Delta}_i$ und $C(\eta, \bar{\eta})$ eine beliebige reellwertige Funktion ist.

4.1.4 Virasoro-Algebra

Im Rahmen des Wirkungsprinzips kann man den Energie-Impuls-Tensor T einer beliebigen Quantenfeldtheorie in d -Dimensionen alternativ auch über die Variation von S unter allgemeinen Koordinatentransformationen $x^\mu \rightarrow x^\mu + \epsilon^\mu(x)$ definieren:

$$\delta S = \int d^2x T^{\mu\nu}(x) \partial_\mu \epsilon_\nu. \quad (4.24)$$

Die Theorie ist genau dann konform invariant, wenn δS für alle Transformationen, die der Bedingung (4.6) genügen, verschwindet, d.h. daß der Energie-Impuls-Tensor T spurfrei ist:

$$T^\mu_\mu = 0. \quad (4.25)$$

Führt man für $d = 2$ wieder die komplexen Koordinaten z und \bar{z} ein, so ist die Spurfreiheit von T wegen der damit verbundenen Translations- und Rotationsinvarianz äquivalent zu

$$\bar{\partial}T = 0, \quad \partial\bar{T} = 0, \quad (4.26)$$

mit

$$\begin{aligned} T(z) &= T_{11}(z, \bar{z}) - T_{22}(z, \bar{z}) + 2iT_{12}(z, \bar{z}), \\ \bar{T}(\bar{z}) &= T_{11}(z, \bar{z}) - T_{22}(z, \bar{z}) - 2iT_{12}(z, \bar{z}), \end{aligned} \quad (4.27)$$

d.h. der Energie-Impuls-Tensor kann in einen holomorphen und antiholomorphen Anteil aufgespalten werden.

Als nächstes soll das Transformationsverhalten von T bzw. \bar{T} , die im Rahmen einer Quantenfeldtheorie Operatoren sind, unter konformen Abbildungen untersucht werden. Dazu benötigt man einerseits die sogenannte Operatorproduktentwicklung (OPE), andererseits die konforme WARD-Identität [6].

Die OPE basiert im Rahmen des *Bootstrap-Approach* auf der Operatoralgebra-Hypothese, die eine Verallgemeinerung der WILSONschen OPE ist [6]. Man fordert, daß ein System von unendlich vielen lokalen Feldern $\Psi_i(z)$ existiert, von denen die Menge $\{\Psi_i(0)\}_{i \in I}$ vollständig ist im Sinne von

$$\Psi_i(z)\Psi_j(0) = \sum_{k \in I} C_{ij}^k(z) \Psi_k(0). \quad (4.28)$$

Die Strukturkonstanten $C_{ij}^k(z)$ sind wegen der lokalen Eigenschaften der Operatoren Ψ_i komplexwertige *single-valued* Funktionen, die für $z \rightarrow 0$ divergieren können. Die spezielle Form von $C_{ij}^k(z)$ kann man für den Fall, daß die lokalen Operatoren Ψ_i quasi-primären Feldern Φ_i entsprechen, sofort aus der Invarianz von (4.28) unter global konformen Abbildungen bestimmen und erhält:

$$C_{ij}^k(z) = C_{ij}^k z^{\Delta_k - \Delta_i - \Delta_j}. \quad (4.29)$$

Zu beachten ist, daß die OPE (4.28) nur im schwachen Sinn gültig ist, d.h. nur auf der Ebene der Korrelationsfunktionen.

Betrachtet man die Variation einer n -Punktsfunktion $\langle X \rangle = \langle \Phi_1(z_1, \bar{z}_1) \dots \Phi_n(z_n, \bar{z}_n) \rangle$ von primären Feldern $\Phi_i(z_i, \bar{z}_i)$ unter infinitesimalen lokal konformen Abbildungen $z \rightarrow z + \epsilon(z)$ bzw. $\bar{z} \rightarrow \bar{z} + \bar{\epsilon}(\bar{z})$, so erhält man nach einigen Umformungen den folgenden Ausdruck, den man auch als WARD-Identität bezeichnet [6]:

$$\begin{aligned} \delta_{\epsilon, \bar{\epsilon}} \langle X \rangle &= -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \epsilon(z) \langle T(z) X \rangle + \frac{1}{2\pi i} \oint_C d\bar{z} \bar{\epsilon}(\bar{z}) \langle \bar{T}(\bar{z}) \rangle \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \epsilon(z) \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\Delta_i}{(z - z_i)^2} + \frac{1}{z - z_i} \partial_i \right\} \langle X \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \oint_C d\bar{z} \bar{\epsilon}(\bar{z}) \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\bar{\Delta}_i}{(\bar{z} - \bar{z}_i)^2} + \frac{1}{\bar{z} - \bar{z}_i} \bar{\partial}_i \right\} \langle X \rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Der Integrationsweg C ist dabei so gewählt, daß er alle Punkte (z_i, \bar{z}_i) der primären Felder Φ_i einschließt.

Damit ist man in der Lage, die OPE des Energie-Impuls-Tensors T bzw. \bar{T} mit einem primären Feld der konformen Dimension $(\Delta, \bar{\Delta})$ zu berechnen:

$$\begin{aligned} T(z) \Phi(w, \bar{w}) &= \frac{\Delta}{(z - w)^2} \Phi(w, \bar{w}) + \frac{1}{(z - w)} \partial_w \Phi(w, \bar{w}) + \text{reguläre Terme}, \\ \bar{T}(\bar{z}) \Phi(w, \bar{w}) &= \frac{\bar{\Delta}}{(\bar{z} - \bar{w})^2} \Phi(w, \bar{w}) + \frac{1}{(\bar{z} - \bar{w})} \partial_{\bar{w}} \Phi(w, \bar{w}) + \text{reguläre Terme}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Ausgehend von (4.31) läßt sich die OPE des Energie-Impuls-Tensors T mit sich selbst bestimmen:

$$T(z) T(w) = \frac{c/2}{(z - w)^4} + \frac{2}{(z - w)^2} T(w) + \frac{1}{(z - w)} \partial_w T(w) + \text{reguläre Terme}. \quad (4.32)$$

Einen analogen Ausdruck erhält man für den antiholomorphen Anteil $\bar{T}(\bar{z})$. Die in (4.32) auftretende Konstante c wird zentrale Ladung genannt und hängt von dem jeweils betrachteten Modell ab.

Vergleicht man Gleichung (4.32) mit (4.31), so sieht man, daß sich der Energie-Impuls-Tensor wegen des Terms $\sim c$ nicht wie ein primäres Feld transformiert. Mittels der konformen WARD-Identität (4.30) und der OPE (4.32) läßt sich die Variation von $T(z)$ unter infinitesimalen, lokal konformen Abbildungen, $z \rightarrow z + \epsilon(z)$ schreiben als:

$$\begin{aligned} \delta_\epsilon T(z) &= -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \epsilon(z) T(z) T(w) \\ &= -\{2\partial_w \epsilon(w) + \epsilon(w) \partial_w\} T(w) - \frac{c}{12} \partial_w^3 \epsilon(w). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Für eine endlichen Transformation erhält man damit

$$T(z) \rightarrow T(w) = \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^{-2} \left[T(z) - \frac{c}{12} \{w; z\} \right], \quad (4.34)$$

wobei $\{w; z\}$ die sogenannte SCHWARZsche Ableitung ist:

$$\{w; z\} = \frac{\partial^3 w}{\partial z^3} \bigg/ \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{3}{2} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \bigg/ \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2. \quad (4.35)$$

Da die SCHWARZsche Ableitung für alle global konformen Abbildungen identisch Null ist, entspricht das Transformationverhalten des Energie-Impuls-Tensors $T(z)$ bzw. $\bar{T}(\bar{z})$ gerade dem eines quasi-primären Feldes [5, 6].

Als nächstes entwickelt man den holomorphen sowie den antiholomorphen Anteil des Energie-Impuls-Tensors in eine LAURENT-Reihe um $z, \bar{z} = 0$:

$$\begin{aligned} T(z) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^{-n-2} L_n, \quad L_n = \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{n+1} T(z), \\ \bar{T}(\bar{z}) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{z}^{-n-2} \bar{L}_n, \quad \bar{L}_n = \frac{1}{2\pi i} \oint d\bar{z} \bar{z}^{n+1} \bar{T}(\bar{z}). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Die Generatoren L_n bzw. \bar{L}_n genügen nicht mehr der WITT-Algebra wie l_n bzw. \bar{l}_n , sondern der sogenannten VIRASORO-Algebra [6]:

$$\begin{aligned} [L_n, L_m] &= (n-m)L_{n+m} + \frac{c}{12} n(n^2-1)\delta_{n+m,0}, \\ [\bar{L}_n, \bar{L}_m] &= (n-m)\bar{L}_{n+m} + \frac{c}{12} n(n^2-1)\delta_{n+m,0}, \\ [L_n, \bar{L}_m] &= 0. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Zum Abschluß dieses Abschnitts soll auf die physikalische Bedeutung der zentralen Ladung c eingegangen werden. Dazu betrachtet man eine beliebige konforme Feldtheorie, die auf der gesamten komplexen Ebene definiert ist, und die durch die konforme Transformation

$$z \rightarrow w = w^0 + iw^1 = \frac{L}{2\pi} \ln z \quad (4.38)$$

auf einen Zylinder des Umfangs L abgebildet wird. Der Energie-Impuls-Tensor auf dem Zylinders $T_{Zyl.}(w)$ ist dann nach (4.35) mit dem der Ebene $T(z)$ wie folgt verknüpft:

$$T_{Zyl.}(w) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \left[T(z) z^2 - \frac{c}{12} \right]. \quad (4.39)$$

Unter der Annahme, daß die Vakuumsenergiedichte $\langle T(z) \rangle$ der auf der Ebene definierten Theorie gleich Null ist, erhält man aufgrund der obigen Gleichung eine endliche Vakuumsenergiedichte für den Zylinder

$$\langle T_{Zyl.} \rangle = -\frac{c\pi^2}{6L^2}, \quad (4.40)$$

d.h. die CASIMIR-Energie ist proportional zu der zentralen Ladung c . Da die freie Energie F identisch mit dem erzeugenden Funktional W der zusammenhängenden Graphen ist, ist die Variation von $F_{Zyl.}$ unter $g_{\mu\nu} \rightarrow g_{\mu\nu} + \delta g_{\mu\nu}$ gegeben durch [35, 36]:

$$\delta F_{Zyl.} = -\frac{1}{2} \int d^2x \sqrt{g} \delta g_{\mu\nu} \langle T^{\mu\nu} \rangle. \quad (4.41)$$

Für eine infinitesimale Änderung des Zylinderumfangs $L \rightarrow (1+\delta)L$, $w^0 \rightarrow (1+\delta)w^0$ und $w^1 \rightarrow w^1$, kann man damit das *Finite-Size-Scaling* der freien Energie berechnen:

$$F_L = f_0 L - \frac{\pi c}{6L}. \quad (4.42)$$

f_0 ist die freie Energie pro Einheitszelle im Grenzfall $L \rightarrow \infty$.

Analog dazu läßt sich das Tieftemperaturverhalten der freien Energie für eindimensionale Quantensysteme bestimmen. In diesem Fall ist das System entlang der imaginären Zeitrichtung endlich ausgedehnt, so daß die Größe L äquivalent zu der inversen Temperatur $1/T$ ist und mit der Korrelationslänge $\xi \propto 1/T$ zusammenhängt. Physikalisch gesehen interpretiert man ξ als Kohärenzlänge, die den räumlichen Abstand mißt, auf dem die Quantenkohärenz trotz thermischer Fluktuationen noch existiert, d.h. ξ ist die thermische DE BROGLIE-Wellenlänge des Systems bei Temperatur T . In diesem Fall läßt sich die Gleichung (4.42) wie folgt interpretieren: (4.42) bezeichnet gerade das Vakuumfunktional W pro Einheitszelle eines eindimensionalen Quantensystems, welches mit der freien Energiedichte f über $W = fL$ zusammenhängt, wobei L die Ausdehnung des Systems in Zeitrichtung ist. Damit erhält man das Tieftemperaturverhalten für f bzw. für die spezifische Wärme pro Einheitszelle C :

$$f = f_0 - \frac{1}{6} \pi c T^2, \quad (4.43)$$

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} = \frac{1}{3} \pi c T. \quad (4.44)$$

Man sieht also, daß die zentrale Ladung c der zugrundeliegenden VIRASORO-Algebra entweder aus den *Finite-Size*-Korrekturen der Grundzustandsenergie (4.42) oder aus dem Tieftemperaturverhalten des Systems (4.43) bzw. (4.44) bestimmen werden kann.

4.2 Finite-Size-Korrekturen

In diesem Teil des Kapitels soll die allgemeine Form der Grundzustandsenergie für die dotierte Spin $S = 1$ -Kette bei endlicher Systemgröße L sowie deren niederenergetisches Anregungsspektrum und die dazu korrespondierenden Impulse bestimmt werden. Ausgehend von den *Finite-Size*-Korrekturen läßt sich unter Verwendung der Skaleninvarianz des Modells die effektive Kontinuumstheorie bei tiefen Temperaturen bestimmen. Da es sich um eine konform invariante Theorie handelt, ist man in der Lage, das asymptotische Verhalten von 2-Punkt-Korrelationsfunktionen exakt zu berechnen. Im Gegensatz zu einem unendlich ausgedehnten System ist das Spektrum eines Systems der Länge L diskret. Der durchschnittliche Energieabstand zweier benachbarter Niveaus ist von der Ordnung $1/L$. Basierend auf dem kritischen Verhalten des Modells für $L = \infty$ und der damit verbundenen konformen Invarianz kann man einen Zusammenhang zwischen den *Finite-Size*-Korrekturen und den Skalendimensionen $d_i = \Delta_i + \bar{\Delta}_i$ bzw. den konformen Spins $s_i = \Delta_i - \bar{\Delta}_i$ der primären Felder herstellen. Dies wurde zum erstenmal von CARDY bzw. BOGOLIUBOV *et al.* und BERKOVICH und MURTHY für den Fall, daß nur eine einzige masselose Mode im $L \rightarrow \infty$ Grundzustand vorliegt, berechnet [34, 37, 89]:

$$\begin{aligned} E_0(L) - L\varepsilon_\infty &= -\frac{\pi v_{\mathcal{F}}}{6L} c + \mathcal{O}(1/L^2), \\ E_i(L, N^+, N^-) - E_0(L) &= \frac{2\pi v_{\mathcal{F}}}{L} (d_i + N^+ + N^-) + \mathcal{O}(1/L^2), \\ P_i(L, N^+, N^-) - P_0 &= 2DP_{\mathcal{F}} + \frac{2\pi}{L} (s_i + N^+ - N^-) + \mathcal{O}(1/L^2). \end{aligned} \quad (4.45)$$

$\varepsilon_\infty(E_0/L)$ ist die Grundzustandsenergiedichte des unendlich ausgedehnten (endlichen) Systems und v_F bzw. P_F die FERMI-Geschwindigkeit bzw. der FERMI-Impuls. Die in (4.45) auftretenden natürlichen Zahlen N^\pm und D hängen mit den Teilchen-Lochanregungen an den beiden Fermipunkten X^\pm bzw. mit der Anzahl der an X^- nach X^+ gestreuten Quasiteilchen zusammen. Man kann somit die zentrale Ladung c der VIRASORO-Algebra sowie die konformen Dimensionen Δ_i und $\bar{\Delta}_i$ der primären Felder berechnen und die entsprechende Universalitätsklasse des Modells bestimmen [86].

Da im Fall der dotierten Spin $S = 1$ -Kette bis zu drei Anregungsmoden masselos werden, nämlich κ , ϵ_1 und ϵ_2 , assoziiert mit den Störstellen, 1- und 2-Strings, muß man die obigen Formeln verallgemeinern. Ausgehend von der in Kapitel 3 mit Hilfe der String-Hypothese hergeleiteten Form der BETHE-Ansatz-Gleichungen

$$\begin{aligned} J_l^n &= \frac{L}{2\pi} \theta_{n,2}(x_l^n) - \frac{1}{2\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{N_m} \Xi_{n,m}(x_l^n - x_k^m) + \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^{N_h} \theta_n(x_l^n - x_\alpha), \\ I_\alpha &= \frac{1}{2\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{N_m} \theta_m(x_\alpha - x_k^m), \end{aligned} \quad (4.46)$$

sowie der Energie- und Impulseigenwerte (3.24) und (3.25)

$$\begin{aligned} E &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{N_n} \{nH + \epsilon_n^{(0)}(x_l^n)\} - \sum_{\alpha=1}^{N_h} (\mu + H/2), \\ P &\equiv \frac{2\pi}{L} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{N_n} J_l^n + \sum_{\alpha=1}^{N_h} I_\alpha \right\} \pmod{2\pi} \end{aligned} \quad (4.47)$$

lassen sich die *Finite-Size-Korrekturen* berechnen. Wichtig ist, daß sich die Lösungen der BETHE-Ansatz-Gleichungen für ein endliches System von den n -Strings nur in einem Term der Größenordnung $\mathcal{O}(e^{-L})$ unterscheiden. Dies erlaubt es einem, die tatsächlichen Lösungen durch n -Strings zu ersetzen, ohne daß dies einen Beitrag zu den $1/L$ Korrekturen liefert. Die Parität der in (4.47) auftretenden Quantenzahlen $\{I_\alpha, \{J_l^n\}_n\}$ hängt nach (3.31) wieder von der Anzahl der Störstellen N_h und der n -Strings N_n ab.

Es zeigt sich, daß für das weitere Vorgehen nur die drei masselosen Bänder κ , ϵ_1 und ϵ_2 relevant sind und deshalb berücksichtigt werden müssen [45, 47]. Betrachtet man für einen durch eine Störstellen- und String-Konfiguration charakterisierten Zustand die Verteilung der Quantenzahlen $\{I_\alpha\}$ und $\{J_l^i\}_{i=1,2}$, so findet man, daß diese für den Fall eines endlichen Systems bzw. für Anregungen nicht mehr symmetrisch sein muß und Löcher aufweisen kann. Daher führt man ganze Zahlen I_\pm und J_\pm^i ein:

$$\begin{aligned} N_h &= I_+ - I_- \quad \text{und} \quad I_+ + I_- = -2D_h, \\ N_i &= J_+^i - J_-^i \quad \text{und} \quad J_+^i + J_-^i = -2D_i, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Diese müssen aufgrund von (3.31), d.h.

$$I_\alpha \equiv \frac{N_1 + N_2}{2} \pmod{1} \quad \text{und} \quad J_l^i \equiv \frac{N_h + N_i + 1}{2} \pmod{1}, \quad i=1,2, \quad (4.49)$$

den nachfolgenden Gleichungen genügen:

$$I_{\pm} \equiv \frac{N_1 + N_2 + 1}{2} \pmod{1} \text{ bzw. } J_{\pm}^i \equiv \frac{N_h + N_i}{2} \pmod{1}, \quad i=1,2. \quad (4.50)$$

Physikalisch gesehen entspricht κ gerade einem FERMI-See von Störstellenrapiditäten mit N_h Quasiteilchen, von denen D_h von dem linken zu dem rechten FERMI-Punkt hinübergestreut wurden. Analoge Überlegungen gelten für die beiden anderen Anregungsmoden ϵ_1 und ϵ_2 . Um nun das thermodynamische Verhalten von großen, aber endlichen Systemen näher zu untersuchen, wendet man die EULER-MACLAURIN-Summenformel

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L f(x_l) &= \int_{X^-}^{X^+} dx f(x) \rho_L(x) - \frac{1}{24L^2} \left\{ \frac{f'(X^+)}{\rho_L(X^+)} - \frac{f'(X^-)}{\rho_L(X^-)} \right\} \\ &= \int_X dx f(x) \rho_L(x) - \frac{1}{24L^2} \frac{f'(x)}{\rho_L(x)} \Big|_X \end{aligned} \quad (4.51)$$

auf die differenzierte Form der Gleichung (4.46) an und erhält für die *String*- und Störstellendichten:

$$\begin{aligned} \sigma_{n,L}(x) &= \hat{A}_{n,2} * p(x) - \sum_{m=1}^2 \hat{A}_{n,m} * \sigma_{m,L}(x|X_m^{\pm}) - \hat{a}_n * \rho_L(x|X_h^{\pm}) \\ &\quad - \frac{1}{24L^2} \left\{ \sum_{m=1}^2 \frac{A'_{n,m}(x-x')}{\sigma_{m,L}(x')} \Big|_m - \frac{a'_n(x-x')}{\rho_L(x')} \Big|_h \right\}, \end{aligned} \quad (4.52)$$

$$\rho_L(x) = \sum_{n=1}^2 \hat{a}_n * \sigma_{n,L}(x|X - n^{\pm}) + \frac{1}{24L^2} \sum_{n=1}^2 \frac{a'_n(x-x')}{\sigma_{n,L}(x')} \Big|_n. \quad (4.53)$$

Die Integralgrenzen X_i^{\pm} , $i = 1, 2$, und X_h^{\pm} werden bestimmt durch die Bedingungen:

$$n_i = \int_i dx \sigma_{i,L}(x) \quad \text{und} \quad d_i = \frac{1}{2} \left(\int_{X_i^+}^{\infty} - \int_{-\infty}^{X_i^-} \right) dx \sigma_{i,L}(x), \quad (4.54)$$

sowie:

$$n_h = \int_h dx \rho_L(x) \quad \text{und} \quad d_h = \frac{1}{2} \left(\int_{X_h^+}^{\infty} - \int_{-\infty}^{X_h^-} \right) dx \rho_L(x). \quad (4.55)$$

Bisher wurden nur die Beiträge zu den *Finite-Size*-Korrekturen berücksichtigt, die von der Veränderung der Quasiteilchenzahl N_{α} und der Verschiebung der FERMI-Seen D_{α} stammen, nicht jedoch die Beiträge der Teilchen-Lochanregungen N_{α}^{\pm} in der Nähe der jeweiligen FERMI-Punkte X_{α}^{\pm} sowie aus Anregungen in ungefüllte Quasiteilchenbänder. Aus Gründen der Übersichtlichkeit setzt man ρ_L gleich $\sigma_{0,L}$ und erhält für die Gleichung: (4.52)

$$\sigma_{\alpha,L}(x) = \sigma_{\alpha}^{(0)}(x) - \sum_{\beta=0}^2 \hat{T}_{\alpha\beta} * \sigma_{\beta,L}(x|X_{\beta}^{\pm}) - \frac{1}{24L^2} \sum_{\beta=0}^2 \frac{T'_{\alpha\beta}(x-x')}{\sigma_{\beta,L}(x')} \Big|_{\beta}. \quad (4.56)$$

Hier ist $\sigma_0^{(0)} = 0$, $\sigma_i^{(0)} = \hat{A}_{i,2} * p$, $X_0^\pm = X_h^\pm$ und $T_{\alpha\beta}(x)$ der symmetrischen Integrationskern, $T_{\alpha\beta}(x) = T_{\beta\alpha}(x) = T_{\alpha\beta}(-x)$:

$$T(x) = \begin{pmatrix} 0 & -a_1(x) & -a_2(x) \\ -a_1(x) & a_2(x) & a_3(x) + a_1(x) \\ -a_2(x) & a_3(x) + a_1(x) & a_4(x) + 2a_2(x) \end{pmatrix}. \quad (4.57)$$

Die Lösung der linearen Integralgleichung (4.56) läßt sich formal schreiben als

$$\sigma_{\alpha,L}(x) = \sigma_\alpha(x; X^\pm) - \frac{1}{24L^2} \sum_\beta \left\{ \frac{t_{\alpha\beta}^+(x)}{\sigma_{\beta,L}(X_\beta^+)} + \frac{t_{\alpha\beta}^-(x)}{\sigma_{\beta,L}(X_\beta^-)} \right\}, \quad (4.58)$$

wobei die Funktionen $\sigma_\alpha(x; X^\pm)$ und $t_{\alpha\beta}^\pm(x)$ wie folgt definiert sind:

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(x; X^\pm) &= \sigma_\alpha^{(0)}(x) - \sum_\beta \hat{T}_{\alpha\beta} * \sigma_\beta(x; X^\pm), \\ t_{\alpha\beta}^\pm(x) &= \pm T'_{\alpha\beta}(x - X_\beta^\pm) - \sum_\gamma \hat{T}_{\alpha\gamma} * t_{\gamma\beta}^\pm(x|X_\gamma^\pm). \end{aligned} \quad (4.59)$$

X^\pm bezeichnet dabei die Menge aller FERMI-Impulse, d.h. $X^\pm = \{X_\alpha^\pm\}$. Wendet man die EULER-MACLAURIN-Summenformel auf den Ausdruck (4.47) für die Energie E an, so ergibt sich, wie in Anhang A gezeigt wird, das Resultat

$$E = L \varepsilon(\{N_\alpha\}, \{D_\alpha\}) - \frac{\pi}{12L} \sum_\alpha \{v_\alpha(X_\alpha^+) - v_\alpha(X_\alpha^-)\} \quad (4.60)$$

mit der Energiedichte ε

$$\varepsilon(X^\pm) = \varepsilon(\{N_\alpha\}, \{D_\alpha\}) = \sum_\alpha \int_\alpha dx \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x) \sigma_\alpha(x; X^\pm) \quad (4.61)$$

und $\tilde{\epsilon}_0^{(0)}(x) = -(\mu + H/2)$ bzw. $\tilde{\epsilon}_n^{(0)}(x) = nH + \epsilon_n^{(0)}(x)$, für $n = 1, 2$. $v_\alpha(X_\alpha^\pm)$ ist die wie üblich definierte FERMI-Geschwindigkeit der Anregungsmode ϵ_α an den jeweiligen FERMI-Punkten X_α^\pm . Den Grundzustand des unendlich ausgedehnten Systems erhält man durch Minimierung von $\varepsilon(X^\pm)$ bzgl. n_α und d_α bzw. X_α^\pm :

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \partial_{X_\alpha^\pm} \varepsilon(X^\pm) \\ &= \pm \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(X_\alpha^\pm) \sigma_\alpha(X_\alpha^\pm; X^\pm) + \sum_\beta \int_\beta dx \tilde{\epsilon}_\beta^{(0)}(x) \partial_{X_\alpha^\pm} \sigma_\beta(x; X^\pm) \\ &= \pm \epsilon_\alpha(X_\alpha^\pm) \sigma_\alpha(X_\alpha^\pm; X^\pm). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Dies ist äquivalent zu der Forderung, daß die *Dressed-Energies* $\epsilon_\alpha(x)$ an den korrespondierenden FERMI-Punkten verschwinden müssen, bzw. daß aufgrund der Symmetrieeigenschaften von $\epsilon_\alpha(x)$ für den Grundzustand $X_{0,\alpha}^\pm = \pm X_{0,\alpha}$ ist. Unter der Annahme, daß die FERMI-Punkte X_α^\pm der niederenergetischen Anregungen von derselben Größenordnung wie

$X_{0,\alpha}^\pm$ sind, d.h. $\delta X_\alpha^\pm = X_\alpha^\pm - X_{0,\alpha}^\pm \ll 1$, läßt sich das Spektrum annähern, indem man die Gleichung (4.60) bis zur zweiten Ordnung in δX_α^\pm entwickelt:

$$\begin{aligned} E/L &= \varepsilon_\infty - \frac{\pi}{6L} \sum_\alpha v_\alpha \\ &+ \pi \sum_\alpha v_\alpha \left\{ [\sigma_\alpha(X_{0,\alpha}^+; X_0^\pm) \delta X_\alpha^+]^2 + [\sigma_\alpha(X_{0,\alpha}^-; X_0^\pm) \delta X_\alpha^-]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Hier sind $v_\alpha \simeq v_\alpha(X_\alpha^+) \simeq -v_\alpha(X_\alpha^-)$ die entsprechenden FERMI-Geschwindigkeiten und ε_∞ die Grundzustandsenergiedichte. Um die *Finite-Size*-Korrekturen in Abhängigkeit von der Quasiteilchenanzahl N_α und der Asymmetrie D_α zu schreiben, benötigt man zudem noch die JAKOBI-Determinante der Transformation $\{X_\alpha^\pm\} \rightarrow \{N_\alpha, D_\alpha\}$. Man startet von den beiden in Anhang B hergeleiteten Gleichungen:

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(X_\alpha^\pm; X^\pm) \partial_{n_\beta} X_\alpha^\pm \Big|_{X^\pm=X_0^\pm} &= \pm \frac{1}{2} (Z^{-1})_{\alpha\beta}, \\ \sigma_\alpha(X_\alpha^\pm; X^\pm) \partial_{d_\beta} X_\alpha^\pm \Big|_{X^\pm=X_0^\pm} &= Z_{\beta\alpha}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Die Matrix Z hängt über $Z_{\alpha\beta} = \zeta_{\alpha\beta}(X_{0,\beta}^\pm; X_0^\pm)$ mit der *Dressed-Charge*-Matrix ζ zusammen [87, 13, 14]:

$$\zeta_{\alpha\beta}(x; X^\pm) = \delta_{\alpha\beta} - \sum_\gamma \int_\gamma dx' \zeta_{\alpha\gamma}(x'; X^\pm) T_{\gamma\beta}(x - x'). \quad (4.65)$$

Für den in (4.63) auftretenden Ausdruck $\sigma_\alpha(X_{0,\alpha}^\pm; X_0^\pm) \delta X_\alpha^\pm$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(X_{0,\alpha}; \{X_0^\pm\}) \delta X_\alpha^\pm &= \sigma_\alpha(X_{0,\alpha}; X_0^\pm) \times \\ &\sum_\beta \left[\partial_{n_\beta} X_\alpha^\pm \Big|_{X^\pm=X_0^\pm} \Delta n_\beta + \partial_{d_\beta} X_\alpha^\pm \Big|_{X^\pm=X_0^\pm} \Delta d_\beta \right] \\ &= \pm \frac{1}{2L} \sum_\beta (Z^{-1})_{\alpha\beta} \Delta N_\beta + \frac{1}{L} \sum_\beta Z_{\beta\alpha} \Delta D_\beta. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Mit $\Delta N_\alpha = N_\alpha(X^\pm) - N_\alpha(X_0^\pm)$ bzw. $\Delta D_\alpha = D_\alpha(X^\pm) - D_\alpha(X_0^\pm) = D_\alpha(X^\pm)$ und der Matrix $V = \text{diag}(v_0, v_1, v_2)$ erhält man für das Anregungsspektrum des endlichen Systems:

$$E \simeq L\varepsilon_\infty - \frac{\pi}{6L} \sum_\alpha v_\alpha + \frac{2\pi}{L} \left[\mathbf{D}^T [Z V Z^T] \mathbf{D} + \frac{1}{4} \Delta \mathbf{N}^T [(Z^{-1})^T V (Z^{-1})] \Delta \mathbf{N} \right]. \quad (4.67)$$

Die *Finite-Size*-Korrekturen der Grundzustandsenergie bzw. der niederenergetischen Anregungen sind demnach gegeben durch:

$$\begin{aligned} E_0(L) - L\varepsilon_\infty &= -\frac{\pi}{6L} \sum_\alpha v_\alpha, \\ E_L(\{N_\alpha; D_\alpha\}) - E_0(L) &= \frac{2\pi}{L} \left[\mathbf{D}^T [Z V Z^T] \mathbf{D} + \frac{1}{4} \Delta \mathbf{N}^T [(Z^{-1})^T V (Z^{-1})] \Delta \mathbf{N} \right]. \end{aligned} \quad (4.68)$$

In Anlehnung an das Ergebnis von J. CARDY folgt daraus, daß die effektive Kontinuums-theorie der dotierten Spin $S = 1$ -Kette bei tiefen Temperaturen gerade ein direktes Produkt von bis zu drei VIRASORO-Algebren mit zentraler Ladung $c = 1$ ist, je nachdem, wieviele der drei möglichen Anregungsmoden in der betrachteten Phase tatsächlich masselos sind.

Berücksichtigt man die Teilchen-Lochanregungen in der Nähe der jeweiligen FERMI-Punkte, so sind, wie in Anhang B gezeigt wird, die *Finite-Size*-Korrekturen der Energie (4.69) bzw. der Impulse gegeben durch:

$$E_L(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) - E_0(L) = \frac{2\pi}{L} \sum_\alpha v_\alpha \{N_\alpha^+ + N_\alpha^-\} + \frac{2\pi}{L} \{ \mathbf{D}^T [Z V Z^T] \mathbf{D} + \frac{1}{4} \Delta \mathbf{N}^T [(Z^{-1})^T V (Z^{-1})] \Delta \mathbf{N} \}, \quad (4.69)$$

$$P(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) = \frac{2\pi}{L} \left\{ \mathbf{N}^T \mathbf{D} + \sum_\alpha (N_\alpha^+ - N_\alpha^-) \right\}. \quad (4.70)$$

Abschließend soll der Einfluß von Anregungen auf die *Finite-Size*-Korrekturen in ungefüllte Quasiteilchenbänder untersucht werden, d.h. in Bänder, die eine Anregungslücke $\epsilon_n(0) > 0$ mit $n \neq 1, 2$ weisen. Da die Beiträge additiv sind und da das Minimum von $\epsilon_n(x)$ bei $x = 0$ liegt, soll zunächst der Spezialfall einer einzigen *n-String*-Anregung bei $x = 0$ betrachtet werden, d.h. die *n-String*-Dichte ist gegeben durch: $\sigma_n(x) = \delta(x)/L$. In (4.56) läßt sich die Inhomogenität $\sigma_\alpha^{(0)}(x)$ durch $\sigma_\alpha^{(0)}(x) - A_{\alpha,n}(x)/L$ ersetzen und man erhält für die Dichten $\sigma_{\alpha,L}^n(x)$ das Resultat:

$$\sigma_{\alpha,L}^n(x) = \sigma_\alpha(x; X^\pm) - \frac{1}{L} \sigma_\alpha^n(x) - \frac{1}{24L^2} \sum_\beta \left\{ \frac{t_{\alpha\beta}^+(x)}{\sigma_{\beta,L}^n(X_\beta^+)} + \frac{t_{\alpha\beta}^-(x)}{\sigma_{\beta,L}^n(X_\beta^-)} \right\}. \quad (4.71)$$

Hier ist $\sigma_\alpha^n(x) = A_{\alpha,n}(x) - \sum_\beta \hat{T}_{\alpha\beta} * \sigma_\alpha^n(x|X_\beta^\pm)$. Da die Gleichung (4.67) nur bis zur Ordnung $1/L$ exakt ist, ändert sich die Form von (4.69) und (4.70) durch diese *n-String*-Anregungen nicht. Einzig die auftretenden Teilchenanzahlen N_α müssen modifiziert werden:

$$\begin{aligned} N_\alpha^n &= N_\alpha - \int_\alpha dx \sigma_\alpha^n(x) \\ &= N_\alpha - \sum_\beta \int_\alpha dx \hat{K}_{\alpha\beta}^{-1} * A_{\beta,n}(x), \text{ mit } \hat{K}_{\alpha\beta} = \hat{1}_{\alpha\beta} + \hat{T}_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

4.3 Tomonaga-Luttinger-Phase B1

Da die *Dressed-Energy-Mode* ϵ_1 in der Phase B1 eine endliche Anregungslücke aufweist, wird das Tieftemperaturverhalten des Systems vollständig durch die Eigenschaften der beiden masselosen Anregungsmoden ϵ_0 und ϵ_2 bestimmt. Insbesondere kann man den symmetrischen Integrationskern $T_{\alpha\beta}$ (4.57) wegen $0 < X_0 < \infty$, $0 < X_2 < X_2^{B1/C}$ und $X_1 = 0$ vereinfachen zu:

$$T^{B1} = \begin{pmatrix} 0 & -a_2 \\ -a_2 & a_4 + 2a_2 \end{pmatrix}. \quad (4.73)$$

Damit sind die *Finite-Size*-Korrekturen zur Grundzustandsenergie (4.69) gegeben durch

$$E_0(L) - L\varepsilon_\infty = -\frac{\pi}{6L}(v_0 + v_2), \quad (4.74)$$

mit den wie üblich definierten FERMI-Geschwindigkeiten v_0 und v_2 der ϵ_0 - und ϵ_2 -Mode. Ausgehend von Gleichung (4.74) läßt sich die effektive Tieftemperaturtheorie der dotierten Spin $S = 1$ -Kette in dieser Phase als ein semidirektes Produkt zweier unabhängiger VIRASORO-Algebren, je mit zentraler Ladung $c = 1$, auffassen. Diese etwas oberflächliche Betrachtungsweise ist jedoch nicht korrekt, da die konformen Dimensionen der primären Felder von dem externen Magnetfeld H und der Störstellenkonzentration x_h abhängen. Dies sieht man am einfachsten, wenn man die *Finite-Size*-Korrekturen des niederenergetischen Anregungsspektrums (4.69) in eine äquivalente Form zu der von J. CARDY *et al.* (4.45) bringt [34, 37, 89]:

$$E_L^{B1}(\{N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) - E_0(L) = \frac{2\pi}{L} \{v_0(\Delta_0^+ + \Delta_0^-) + v_2(\Delta_2^+ + \Delta_2^-)\}. \quad (4.75)$$

Der durch die Quantenzahlen N_α , D_α sowie N_α^\pm , $\alpha = 0, 2$, festgelegte Zustand mit Energie (4.75) und Impuls (4.45)

$$\begin{aligned} P_L^{B1}(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) - P_0(L) &= 2D_0\mathcal{P}_{0,\mathcal{F}} + 2D_2\mathcal{P}_{2,\mathcal{F}} \\ &\quad + \frac{2\pi}{L} \{\Delta \mathbf{N}^T \mathbf{D} + N_0^+ - N_0^- + N_2^+ - N_2^-\} \\ &\simeq 2D_0\mathcal{P}_{0,\mathcal{F}} + 2D_2\mathcal{P}_{2,\mathcal{F}} \end{aligned} \quad (4.76)$$

ergibt sich durch Anwendung eines Operators $\phi_{\Delta^\pm}(x, t)$ mit konformen Dimensionen

$$\begin{aligned} 2\Delta_0^\pm(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) &= \left\{ D_0 Z_{00} + D_2 Z_{20} \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{\Delta N_0 Z_{22} - \Delta N_2 Z_{20}}{2 \det Z} \right\}^2 + 2N_0^\pm \\ 2\Delta_2^\pm(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) &= \left\{ D_0 Z_{02} + D_2 Z_{22} \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{\Delta N_2 Z_{00} - \Delta N_0 Z_{02}}{2 \det Z} \right\}^2 + 2N_2^\pm \end{aligned} \quad (4.77)$$

auf den Grundzustand $|\Psi_{B1}(L)\rangle$. Da die konformen Spins s und Skalendimensionen d von der *Dressed-Charge*-Matrix ζ abhängen und diese ihrerseits wieder über die FERMI-Punkte X_0 und X_2 mit dem äußeren Magnetfeld H und dem chemischen Störstellenpotential μ verknüpft ist, sind die beiden VIRASORO-Algebren nicht unabhängig. Desweiteren erkennt man auch, daß die Quantenzahlen D_0 und D_2 keineswegs frei wählbar sind: Der Grundzustand ist durch $\Delta N_0 = \Delta N_2 = D_0 = D_2 = 0$ charakterisiert. Somit besteht aufgrund von (3.31) für jeden angeregten Zustand zwischen ΔN_0 , ΔN_2 , D_0 und D_2 der folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned} D_0 &\equiv \frac{\Delta N_0 + \Delta N_2}{2} \pmod{1}, \\ D_2 &\equiv \frac{\Delta N_0}{2} \pmod{1}. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Ausgehend von den konformen Dimensionen (4.77) läßt sich das Feld $\phi_{\Delta\pm}(x, t)$ schreiben als:

$$\phi_{\Delta\pm}(x, t) = \sum_{N_\alpha^\pm} \sum_{\Delta N_\alpha} \sum_{D_\alpha} \phi(N_\alpha^\pm, \Delta N_\alpha, D_\alpha) \mathcal{V}_{\beta_0, \bar{\beta}_0}(z_0, \bar{z}_0) \otimes \mathcal{V}_{\beta_2, \bar{\beta}_2}(z_2, \bar{z}_2). \quad (4.79)$$

Dabei sind $\phi(N_\alpha^\pm, \Delta N_\alpha, D_\alpha)$ unbekannte Entwicklungskoeffizienten und

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\beta_\alpha, \bar{\beta}_\alpha}(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) &= \exp\{-i(z_\alpha + \bar{z}_\alpha)\mathcal{P}_{\mathcal{F}, \alpha} D_\alpha\} V_{\beta_\alpha}(z_\alpha) \otimes \bar{V}_{\bar{\beta}_\alpha}(\bar{z}_\alpha), \text{ mit } \alpha = 0, 2, \\ \beta_\alpha^2 &= 8\pi\Delta_\alpha^+ \text{ sowie } \bar{\beta}_\alpha^2 = 8\pi\Delta_\alpha^-. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Die Vertex-Operatoren $V_\beta(z)$ sowie $\bar{V}_{\bar{\beta}}(\bar{z})$ sind in Anhang C definiert und die in (4.79) auftretende Summe \sum'_{D_α} ist so zu verstehen, daß für gegebene N_0 und N_2 die D_α s der Bedingung (4.78) genügen. Die Grundzustands-Paarkorrelationsfunktion von $\phi_{\Delta\pm}(x, t)$ ist damit, vgl. Anhang C, am kritischen Punkt bei $T = 0$ gegeben durch:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\Delta\pm}(x, t) \phi_{\Delta\pm}(0, 0) \rangle &= \\ \sum_{N_\alpha^\pm} \sum_{\Delta N_\alpha} \sum_{D_\alpha} &\frac{\phi(\Delta N_\alpha, D_\alpha, N_\alpha^\pm) \exp(-2iD_0\mathcal{P}_{0, \mathcal{F}} x) \exp(-2iD_2\mathcal{P}_{2, \mathcal{F}} x)}{(x - iv_0 t)^{2\Delta_0^+} (x + iv_0 t)^{2\Delta_0^-} (x - iv_2 t)^{2\Delta_2^+} (x + iv_2 t)^{2\Delta_2^-}}. \end{aligned} \quad (4.81)$$

Bei tiefen aber endlichen Temperaturen $0 < T \ll 1$ zerfallen alle n -Punktfunktionen $\mathcal{G}^{(n)}$ nicht mehr algebraisch sondern exponentiell. Analog zu dem Vorgehen in Abschnitt 4.1.4 bei der Berechnung der Tieftemperaturentwicklung der freien Energie F kann man auch hier das asymptotische Verhalten der Korrelatoren für große Abstände bestimmen. Das Ergebnis ist von derselben Struktur wie (4.81), nur daß die Terme im Nenner von (4.81) gemäß

$$(x \mp ivt)^{2\Delta^\pm} \rightarrow \left\{ \frac{v}{\pi T} \sinh \left[\frac{\pi T}{v} (x \mp ivt) \right] \right\}^{2\Delta^\pm} \quad (4.82)$$

ersetzt werden.

Basierend auf den abgeleiteten Vorhersagen der konformen Feldtheorie soll nun das asymptotische Verhalten von einigen physikalisch relevanten n -Punktfunktionen berechnet werden. Von besonderem Interesse sind der longitudinale und der transversale Spin-Spin-Korrelator

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\sigma, \sigma}^l(x, t) &= \langle \hat{S}^z(x, t) \hat{S}^z(0, 0) \rangle, \\ \mathcal{G}_{\sigma, \sigma}^t(x, t) &= \langle \hat{S}^-(x, t) \hat{S}^+(0, 0) \rangle, \end{aligned} \quad (4.83)$$

sowie die Störstellen-Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

$$\mathcal{G}_{x_h, x_h}(x, t) = \langle \hat{x}_h(x, t) \hat{x}_h(0, 0) \rangle. \quad (4.84)$$

Diese sind alle von der Form $\langle \hat{O} \hat{O}^\dagger \rangle$ einer 2-Punktfunktion und können im Rahmen der konformen Feldtheorie eindeutig bestimmt werden. Um das asymptotische Verhalten (4.81) konformer Felder verwenden zu können, muß zunächst der jeweilige Operator \hat{O} nach den Operatoren $\phi_{\Delta\pm}$ entwickelt werden.

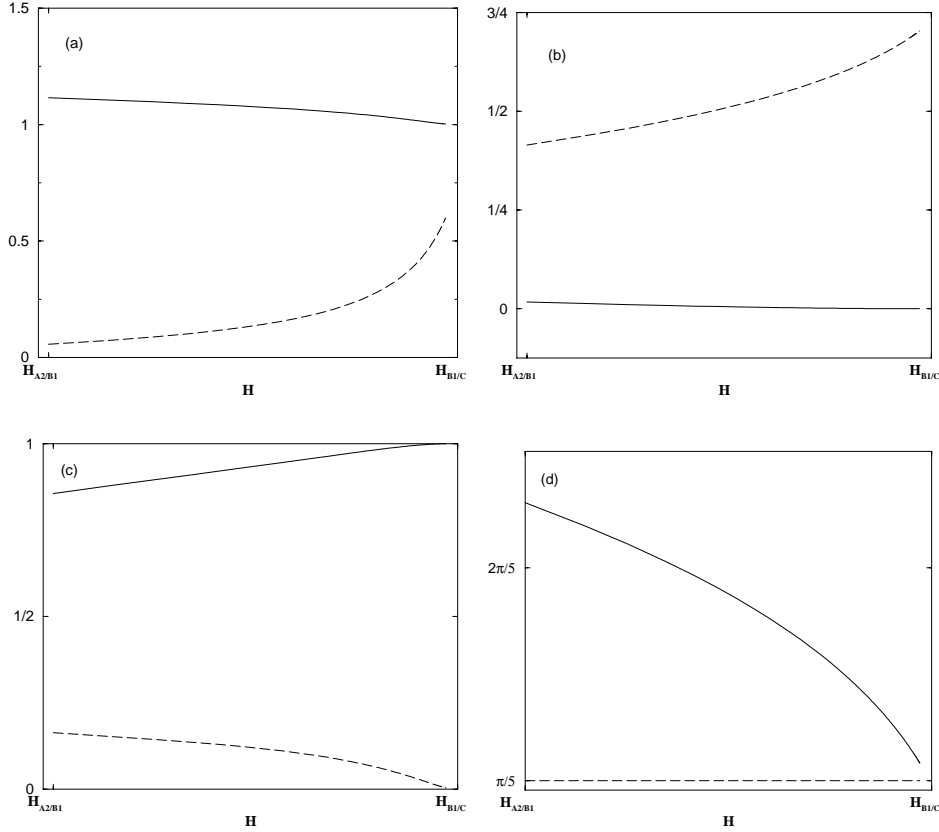


Abbildung 4.1. Konforme Dimensionen $2\Delta_0$ (durchgezogene Linien) und $2\Delta_2$ (gestrichelte Linien) der longitudinalen Spin-Spin-Korrelationsfunktion bei konstanter Störstellenkonzentration $x_h = 0.2$ für (a) : $D_0 = \pm 1, D_2 = 0$, (b) : $D_0 = 0, D_2 = \pm 1$ sowie (c) : $D_0 = -D_2 = \pm 1$ vs. äußeres Magnetfeld H . In (d) sind die entsprechenden Fermi-Impulse $\mathcal{P}_{F,0}$ (durchgezogen) und $\mathcal{P}_{F,2}$ (gestrichelt) für $x_h = 0.2$ dargestellt.

Im allgemeinen ist eine solche Entwicklung nicht möglich. Dieses Problem läßt sich mit Hilfe des folgenden Tricks umgehen: Da bekannt ist, wie sich der Operator \hat{O}^\dagger durch die Generatoren der $gl(2|1)$ ausdrücken läßt, kennt man auch die Quantenzahlen $\Delta N_0, \Delta N_2$ des durch den Operator \hat{O}^\dagger erzeugten Zwischenzustandes $|O\rangle = \hat{O}^\dagger |\Psi_{B1}\rangle$. Der führende Term der gesuchten asymptotischen Entwicklung der Korrelationsfunktion $\langle \hat{O} \hat{O}^\dagger \rangle$ zerfällt demnach mindestens mit den minimalen konformen Dimensionen (4.77) — im HUBBARD-Modell sieht man, daß aufgrund der Symmetrieeigenschaften des Modells gewisse Koeffizienten in der Entwicklung von \hat{O}^\dagger verschwinden [90]. Minimal bedeutet an dieser Stelle, daß die statische Skalendimension $d_{st} = \Delta_0^+ + \Delta_0^- + \Delta_2^+ + \Delta_2^-$ des durch die Quantenzahlen ΔN_0 und ΔN_2 definierten Operators \hat{O}^\dagger bzgl. D_0 und D_2 unter Beachtung der Nebenbedingung (4.78) minimiert wird.

Als Beispiel soll die longitudinale Spin-Spin-Korrelationsfunktion $\mathcal{G}_{\sigma,\sigma}^l$ explizit betrachtet werden. Ausgehend von den Kommutatorrelationen der $gl(2|1)$ -Algebra sieht man, daß der Operator $S^z = \sum_{n=1}^L S_n^z / L$ weder die Magnetisierung ändert, noch Störstellen erzeugt oder

vernichtet, d.h. $\Delta N_0 \equiv \Delta N_h = 0 = \Delta N_2$. Aufgrund von (4.78) müssen D_0 und D_2 ganzzahlig sein. Die statische Skalendimension ist durch den Ausdruck

$$d_{\sigma,\sigma}^l = 2\Delta_0 + 2\Delta_2 = \{D_0 Z_{00} + D_2 Z_{20}\}^2 + \{D_0 Z_{02} + D_2 Z_{22}\}^2 \quad (4.85)$$

gegeben, der noch bzgl. D_0 und D_2 minimiert werden muß. Für $x_h = 0.2$ sind in Abbildung (4.1) (a) – (c) die kleinsten konformen Dimensionen $2\Delta_0$ und $2\Delta_2$ gegen das äußere Magnetfeld H aufgetragen, ebenso die beiden FERMI-Impulse $\mathcal{P}_{\mathcal{F},0}$ und $\mathcal{P}_{\mathcal{F},2}$ in Abbildung (4.1) (d).

Berücksichtigt man ferner die Teilchen-Lochanregungen N_α^\pm in der Nähe der FERMI-Punkte X_α^\pm , so läßt sich der zeitabhängige \hat{S}^z - \hat{S}^z -Korrelator im Limes großer Abstände und Zeiten wegen $\langle \hat{S}^z \rangle = m^z$ schreiben als:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\sigma,\sigma}^l &= (m^z)^2 + \sum g_{\sigma,\sigma}^l(D_0, D_2, N_0^\pm, N_2^\pm) \\ &\times \frac{\exp(-2iD_0\mathcal{P}_{0,\mathcal{F}}x) \exp(-2iD_2\mathcal{P}_{2,\mathcal{F}}x)}{(x - iv_0t)^{2\Delta_0^+} (x + iv_0t)^{2\Delta_0^-} (x - iv_2t)^{2\Delta_2^+} (x + iv_2t)^{2\Delta_2^-}}. \end{aligned} \quad (4.86)$$

Die Summe läuft über alle ganzzahligen D_0 und D_2 sowie natürlichen N_0^\pm und N_2^\pm , die $g_{\sigma,\sigma}^l$ sind unbekannte nicht-universelle Koeffizienten. Das asymptotische Verhalten des Korrelators für große Abstände ist demnach durch die minimale statische Dimension d bestimmt. Ersetzt man die jeweiligen Nenner durch (4.82), so erhält man das entsprechende Ergebnis für endliche Temperaturen $0 < T \ll 1$. Da auch der Operator \hat{x}_h einen Zwischenzustand mit den Quantenzahlen $\Delta N_0 = \Delta N_2 = 0$ erzeugt, ist das asymptotische Verhalten von \mathcal{G}_{x_h, x_h} dasselbe wie von $\mathcal{G}_{\sigma,\sigma}^l$ bis auf den konstanten Term — m^z wird hier durch x_h substituiert — und andere Entwicklungskoeffizienten g_{x_h, x_h} .

Um die transversale Spin-Spin-Korrelationsfunktion zu untersuchen, müssen die Quantenzahlen ΔN_0 und ΔN_2 des durch den Operator $\hat{S}^- = \sum_{n=1}^L \hat{S}_n^-$ erzeugten Zwischenzustands bestimmt werden. \hat{S}^- angewendet auf $|\Psi_{B1}(L)\rangle$ bewirkt einen Spinflip, $\Delta N_\downarrow = 1$, läßt aber die Anzahl der Störstellen konstant, $\Delta N_0 = 0$. Vernachlässigt man den Einfluß der durch eine Anregungslücke getrennten Quasiteilchenbänder ϵ_n , so muß sich wegen $N_\downarrow + N_0 = 2N_2$ die Anzahl der 2-Strings ΔN_2 um $-1/2$ verändern. Dies steht jedoch im Widerspruch zu der Tatsache, daß N_2 nach Konstruktion für jeden beliebigen BETHE-Ansatz-Zustand eine natürliche Zahl ist. Daraus läßt sich folgern, daß in dieser Phase keine niederenergetischen magnonenartigen Spinanregungen existieren. Die elementaren transversalen Spinanregungen bei konstanter Störstellenkonzentration x_h sind charakterisiert durch $\Delta N_0 = 0$ und $\Delta N_2 = \pm 1$ und bewirken eine Veränderung der Magnetisierung um $\Delta M^z = \pm 2$.

Es gibt jedoch eine Vielzahl von Anregungen mit $\Delta M^z = \pm 1$, die auf den ersten Blick für Magnonen gehalten werden könnten. Die Quantenzahlen $\Delta N_0, \Delta N_2$ dieser Anregungszustände müssen der Gleichung

$$\Delta M^z = \frac{1}{2} \Delta N_0 - 2\Delta N_2 \Rightarrow \Delta N_0 = \pm 2 + 4\Delta N_2 \quad (4.87)$$

genügen, was für D_0 und D_2 auf die folgende Bedingung führt:

$$\begin{aligned} D_0 &\equiv \frac{\Delta N_0 + \Delta N_2}{2} \pmod{1} \equiv \frac{\Delta N_2}{2} \pmod{1}, \\ D_2 &\equiv \frac{N_0}{2} \pmod{1} \equiv 0 \pmod{1}. \end{aligned} \quad (4.88)$$

Dies bedeutet, daß eine Veränderung der Magnetisierung $\Delta M^z = \pm 1$ immer mit der Erzeugung bzw. der Vernichtung einer geraden Anzahl von Störstellen einhergeht. Betrachtet man z.B. den Fall $\Delta N_0 = \pm 2$, so finden sich vier verschiedene Anregungstypen:

$$\begin{aligned} (1) \quad & \Delta M^z = +1 \quad \Delta N_0 = +2 \quad \Delta N_2 = \pm 0 \quad D_0, D_2 \in \mathbb{Z}, \\ (2) \quad & \Delta M^z = +1 \quad \Delta N_0 = -2 \quad \Delta N_2 = -1 \quad D_0 \in \mathbb{Z}/2, D_2 \in \mathbb{Z}, \\ (3) \quad & \Delta M^z = -1 \quad \Delta N_0 = +2 \quad \Delta N_2 = +1 \quad D_0 \in \mathbb{Z}/2, D_2 \in \mathbb{Z}, \\ (4) \quad & \Delta M^z = -1 \quad \Delta N_0 = -2 \quad \Delta N_2 = \pm 0 \quad D_0, D_2 \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (4.89)$$

Von besonderem Interesse ist der Einfluß des äußeren Magnetfeldes H auf das Verhalten der Spin-Spin-Korrelatoren, das an die Spins wie folgt ankoppelt:

$$\mathcal{H}_{WW} = H \int dx \hat{S}^z(x). \quad (4.90)$$

Benutzt man für \hat{S}^z , charakterisiert durch die Quantenzahlen $\Delta N_0 = \Delta N_2 = 0$ sowie $D_0, D_2 \in \mathbb{Z}$, die Entwicklung in Vertex-Operatoren (4.79) und (4.80), so läßt sich (4.90) schreiben als:

$$\mathcal{H}_{WW} \propto H \sum_{D_0, D_2} \int dx \cos[2(D_0 \mathcal{P}_{\mathcal{F},0} + D_2 \mathcal{P}_{\mathcal{F},2})x] \cos[\beta_0 \phi_0(x)] \cos[\beta_2 \phi_2(x)]. \quad (4.91)$$

Davon ausgehend läßt sich der Einfluß von \mathcal{H}_{WW} auf das kritische Verhalten des Systems untersuchen. In zwei Dimensionen ist dieser Term nur dann relevant, wenn der oszillierende Anteil $\sim (\mathcal{P}_{\mathcal{F},0} D_0 + \mathcal{P}_{\mathcal{F},2} D_2)$ verschwindet (Kommensurabilität) und die Skalendimension d kleiner als Zwei ist — wegen $\Delta_0^+ = \Delta_0^-$ und $\Delta_2^+ = \Delta_2^-$ handelt es sich bei \hat{S}^z um einen Operator mit konformen Spin $s = 0$ und Skalendimension $d = 2\Delta_0 + 2\Delta_2$ [4, 6]. Anhand der Abbildung (4.1) (d) sieht man, daß für $H \rightarrow H_{B1/C}$ der FERMI-Impuls $\mathcal{P}_{\mathcal{F},2}$ gegen $\mathcal{P}_{\mathcal{F},0} = \pi x_h$ strebt. Die Kommensurabilitätsbedingung läßt sich daher an der Phasengrenze B1/C durch $D_0 = -D_2$ erfüllen, was auf eine minimale Skalendimension $d < 2$ führt — vgl. Abbildung (4.1) (c) für $2\Delta_0 = 1$ und $2\Delta_2 = 0$. In der Nähe von B1/C erhält man daher als effektive niederenergetische Feldtheorie für die Anregungsmode ϵ_0 das sogenannte SINE-GORDON-Modell [4]:

$$S[\phi_0] = \int d^2x \left[\frac{v_0}{2} (\nabla \phi_0)^2 + H \cos \beta_0 \phi_0 \right]. \quad (4.92)$$

Es ist bekannt, daß in diesem Modell die Mode ϵ_0 massiv wird, d.h. sich eine Energielücke ausbildet, wenn der Wechselwirkungsterm $\sim H$ relevant wird, $d < 2$. Ferner ist dieses Modell für $d < 1$ bzw. $\beta < \sqrt{4\pi}$ äquivalent zu einem Modell massiver Fermionen mit der Masse $m \propto H$ [4]. Daher ermöglicht dieses Modell, das Auftreten der Anregungslücke für ϵ_0 bei $H = H_{B1/C}$ sowie den damit verbundenen kontinuierlichen Phasenübergang zu erklären.

4.4 Plateauphase C

Die Phase C ist dadurch charakterisiert, daß ein durch eine Anregungslücke getrenntes Quasiteilchenband ϵ_1 , eine masselose Anregungsmode ϵ_2 und ein teilweise gefüllter FERMI-See

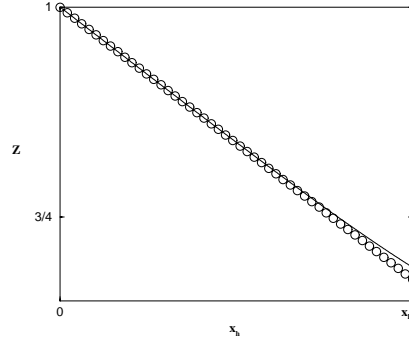


Abbildung 4.2. *Dressed-Charge-Matrix Z in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration x_h : Numerisch (durchgezogene Linie) und näherungsweise analytisch bestimmter Verlauf.*

ϵ_0 vorliegt. Durch Ausintegrieren des FERMI-Sees erhält man für T aus (4.57) den skalaren Integralkern:

$$T^{(C)} = 2a_2. \quad (4.93)$$

Die *Finite-Size*-Korrekturen der Energie (4.69) und des Impulses (4.70) lassen sich somit vereinfachen zu

$$\begin{aligned} E_0^{(C)}(L) - L\varepsilon^{(C)} &= -\frac{\pi}{6L}v_2, \\ E_L^{(C)}(\{\Delta N_2; D_2; N_2^\pm\}) - E_0^{(C)}(L) &= \frac{2\pi v_2}{L} \left\{ (ZD_2)^2 + \left(\frac{\Delta N_2}{2Z} \right)^2 \right\} \\ &\quad + \frac{v_2}{L}(N_2^+ + N_2^-), \\ P_L^{(C)}(\{\Delta N_2; D_2; N_2^\pm\}) - P_0^{(C)}(L) &= 2D_2\mathcal{P}_{2,\mathcal{F}} + \frac{2\pi}{L}(N_2^+ - N_2^-) \\ &= 2D_2\mathcal{P}_{2,\mathcal{F}} + \mathcal{O}(1/L^2), \end{aligned} \quad (4.94)$$

wobei v_2 die FERMI-Geschwindigkeit und $\mathcal{P}_{2,\mathcal{F}} = \pi N_2/L$ der FERMI-Impuls der ϵ_2 -Mode ist. Die *Dressed-Charge-Matrix* Z ist wie üblich definiert:

$$\zeta(x; X^\pm) = 1 - 2\hat{a}_2 * \zeta(x; X^\pm | X_2^\pm) \text{ und } Z = \zeta(X_2^\pm; X^\pm) \Big|_0. \quad (4.95)$$

Für kleine Störstellenkonzentrationen x_h kann man (4.95) wieder bis zur zweiten Ordnung in x_h entwickeln und erhält $Z \simeq 1 - 3x_h/4 + \mathcal{O}(x_h^3)$, vgl. Abbildung (4.2). Da das Tieftemperaturverhalten der Phase C durch die Eigenschaften der einzigen masselosen Mode ϵ_2 vollständig festgelegt wird, ergibt sich aus einem Vergleich der obigen Gleichungen mit den von J. CARDY *et al.* gefundenen Ergebnissen die zentrale Ladung der gesuchten VIRASORO-Algebra zu $c = 1$ und die konformen Dimensionen zu

$$2\Delta_2^\pm(\{\Delta N_2; D_2; N_2^\pm\}) = \left\{ ZD_2 \pm \frac{\Delta N_2}{2Z} \right\}^2 + 2N_2^\pm. \quad (4.96)$$

Der letzte Schritt besteht darin, die Nebenbedingung für die Quantenzahl D_2 zu bestimmen. In dieser Phase ist die Konzentration der Störstellen gleich der der 2 -Strings und damit auch $\Delta N_0 = \Delta N_2$. Dies bedeutet, daß der Einfluß eines gefüllten FERMI-Sees im Gegensatz zu den leeren Quasiteilchenbändern ϵ_n , $n > 2$, bei der Bestimmung von D_2 berücksichtigt werden muß, obwohl dieser eine endliche Lochanregungslücke aufweist und somit auf den ersten Blick vernachlässigbar erscheint:

$$D_2 \equiv \frac{\Delta N_0}{2} \pmod{1} = \frac{\Delta N_2}{2} \pmod{1}. \quad (4.97)$$

Das primäre Feld $\phi_{\Delta_2^\pm}(x, t)$ läßt in dieser Phase analog zu (4.79) bzgl. der Vertex-Operatoren entwickeln, vgl. Anhang C:

$$\phi_{\Delta_2^\pm}(x, t) = \sum_{N_2^\pm} \sum_{\Delta N_2} \sum_{D_2} \phi(N_2^\pm, \Delta N_2, D_2) V_{\beta_2}(z_2) \otimes \bar{V}_{\bar{\beta}_2}(\bar{z}_2). \quad (4.98)$$

Für die durch $\Delta N_0 = \Delta N_\downarrow = 0$ und $D_2 \in \mathbb{Z}$ charakterisierten longitudinalen Spin-Spin- und Störstellen-Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $\mathcal{G}_{\sigma, \sigma}^l(x, t)$ bzw. $\mathcal{G}_{x_h, x_h}(x, t)$ sind daher die den algebraischen Zerfall bestimmenden konformen Dimensionen gegeben durch

$$\left. \begin{aligned} 2\Delta_2^+(\Delta N_2 = N_2^\pm = 0; D_2 = \pm 1) \\ 2\Delta_2^-(\Delta N_2 = N_2^\pm = 0; D_2 = \pm 1) \end{aligned} \right\} = Z^2 \simeq \frac{2 - 3x_h}{2} + \mathcal{O}(x_h^2), \quad (4.99)$$

d.h.

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{G}_{\sigma, \sigma}^l(x, t) - (m^z)^2 \\ \mathcal{G}_{x_h, x_h}(x, t) - (x_h)^2 \end{aligned} \right\} \sim \frac{\cos(2\mathcal{P}_{2, \mathcal{F}} x + \varphi_1)}{|x + iv_2 t|^{2Z^2}}. \quad (4.100)$$

Die numerisch bzw. näherungsweise analytisch bestimmte Abhängigkeit Δ_2^\pm von der Störstellenkonzentration x_h kann aus der Abbildung (4.2) für Z abgelesen werden.

Nun sollen die Eigenschaften der elementaren magnetischen Anregungen dieser Phase untersucht werden. Vernachlässigt wird der Einfluß der, durch eine Anregungslücke getrennten, leeren Quasiteilchenbänder. Die Magnetisierung in dieser Phase ist wegen $N_0 + N_\downarrow = \sum_n N_n = 2N_2$ und $N_0 = N_2$ gegeben durch:

$$M^z = 1 - \frac{N_0}{2} - N_\downarrow = 1 + \frac{N_0}{2} + N_2 = 1 - \frac{3}{2} N_2. \quad (4.101)$$

Man erkennt, daß hier bei konstanter Störstellenkonzentration $\Delta N_h = \Delta N_2 = 0$ nicht nur keine magnonenartigen Spinanregungen mit $\Delta M^z = \pm 1$ existieren können, sondern im Gegensatz zu der TOMONAGA-LUTTINGER-Phase B1 überhaupt keine niederenergetischen Anregungen mit $\Delta M^z = -3\Delta N_0/2 \neq 1$ vorkommen. Die minimale Änderung der Systemmagnetisierung beträgt $\Delta M^z = \pm 3/2$ und wird durch Quasiteilchenanregungen mit Quantenzahlen $\Delta N_\downarrow = \Delta N_2 = \pm 1$ und $D_2 \in \mathbb{Z}/2$ charakterisiert, d.h. $\Delta N_0 = \pm 1$.

4.5 Tomonaga-Luttinger-Phase B2

Um das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktionen berechnen zu können, muß zunächst der Integrationskern $T_{\alpha\beta}$ bestimmt werden. Ähnlich wie in der Phase B1 ist das Tieftemperaturverhalten dieser Phase durch die Eigenschaften zweier masseloser Anregungsmoden charakterisiert, allerdings sind es hier anstelle von ϵ_0 und ϵ_2 die beiden Moden ϵ_1 und ϵ_2 . Ferner liegt in der TOMONAGA-LUTTINGER-Phase B2 anders als in der Phase B1 ein teilweise gefüllter FERMI-See ϵ_0 vor. Durch Ausintegrieren der ϵ_0 -Mode läßt sich der Integrationskern $T_{\alpha\beta}$ (4.57) auf die folgende Form bringen:

$$T^{(B2)} = \begin{pmatrix} 0 & a_1 \\ a_1 & 2a_2 \end{pmatrix}. \quad (4.102)$$

Die *Finite-Size*-Korrekturen der Grundzustandsenergie bzw. des niederenergetischen Anregungsspektrums sind von derselben Struktur wie die der Phase B1. Sie lassen sich aus Gleichung (4.74) gewinnen, indem man den Index 0 durch 1 ersetzt:

$$E_0^{(B2)}(L) - L\varepsilon_\infty^{(B2)} = -\frac{\pi}{6L}(v_1 + v_2), \quad (4.103)$$

$$\begin{aligned} E_L^{(B2)}(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) - E_0^{(B2)}(L) &= \frac{2\pi}{L} \sum_{\alpha=1}^2 v_\alpha (\Delta_\alpha^+ + \Delta_\alpha^-), \\ P_L^{(B2)}(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) - P_0^{(B2)}(L) &= \frac{2\pi}{L} (N_1 D_1 + N_2 D_2) \\ &\quad + \frac{2\pi}{L} \sum_{\alpha=1}^2 (\Delta N_\alpha D_\alpha + N_\alpha^+ - N_\alpha^-). \end{aligned} \quad (4.104)$$

Die konformen Dimensionen Δ_1^\pm und Δ_2^\pm sind gegeben durch:

$$\begin{aligned} 2\Delta_1^\pm(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) &= \left\{ D_1 Z_{11} + D_2 Z_{21} \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{\Delta N_1 Z_{22} - \Delta N_2 Z_{21}}{2 \det Z} \right\}^2 + 2N_1^\pm, \\ 2\Delta_2^\pm(\{\Delta N_\alpha; D_\alpha; N_\alpha^\pm\}) &= \left\{ D_1 Z_{12} + D_2 Z_{22} \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{\Delta N_2 Z_{11} - \Delta N_1 Z_{12}}{2 \det Z} \right\}^2 + 2N_2^\pm \end{aligned} \quad (4.105)$$

und die dazu korrespondierenden Felder $\phi_{\Delta^\pm}(x, t)$ sind von der Form (4.79).

Bei der Bestimmung der Quantenzahlen D_1 und D_2 vernachlässigt man den Einfluß der leeren Quasiteilchenbänder ϵ_n , $n > 2$, berücksichtigt aber wegen $\Delta N_0 = \Delta N_1 + \Delta N_2$ die Änderung der Teilchenzahl ΔN_0 des FERMI-Sees ϵ_0 — analoges Vorgehen wie in der Phase C und erhält schließlich:

$$\begin{aligned} D_1 &\equiv \frac{\Delta N_0}{2} \pmod{1} \equiv \frac{\Delta N_1 + \Delta N_2}{2} \pmod{1}, \\ D_2 &\equiv \frac{\Delta N_0}{2} \pmod{1} \equiv \frac{\Delta N_1 + \Delta N_2}{2} \pmod{1}. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Es sollen nun wieder die longitudinale Spin-Spin- und Störstellen-Dichte-Dichte-Korrelationsfunktionen betrachtet werden. Ausgehend von $\Delta N_\downarrow = \Delta N_0 = 0$, findet man, daß einerseits $\Delta N_1 = \Delta N_2 = 0$ gelten muß, und andererseits aufgrund von (4.106) die D_1 und D_2 ganzzahlig sein müssen. Demnach wird das asymptotische Verhalten der statischen Korrelatoren $\mathcal{G}_{\sigma,\sigma}^l$ und \mathcal{G}_{x_h,x_h} für große Abstände durch das Minimum von

$$d_{\sigma,\sigma}^l = d_{x_h,x_h} = \min_{D_1, D_2} [\{D_1 Z_{11} + D_2 Z_{21}\}^2 + \{D_1 Z_{12} + D_2 Z_{22}\}^2] \quad (4.107)$$

bestimmt. In Abbildung (4.3) sind die konformen Dimensionen $2\Delta_1$ und $2\Delta_2$ in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld H bei konstanter Störstellenkonzentration $x_h = 0.2$ für verschiedene Kombinationen von D_1 und D_2 aufgetragen. Zusammen mit Gleichung (4.3) entnimmt man den Abbildung (4.3) (a) und (b), daß der algebraische Zerfall von $\langle \hat{S}^z(x) \hat{S}^z(0) \rangle$ und $\langle \hat{x}_h(x) \hat{x}_h(0) \rangle$ in der Nähe der Phasengrenzen C/B2 und B2/FM durch die Skalendimension $d(D_1 = 0, D_2 = \pm 1)$ bestimmt wird.

Interessant ist die Tatsache, daß man in dieser Phase magnonenartige Anregungen findet. Ausgehend von $\Delta M^z = \pm 1$ und $\Delta N_0 = 0$ kann man mittels $\Delta N_0 = \Delta N_1 + \Delta N_2$ und $\Delta N_0 + \Delta N_\downarrow = \Delta N_1 + 2\Delta N_2$ die Quantenzahlen ΔN_1 und ΔN_2 bestimmen:

$$\Delta N_1 = -\Delta N_2 = \Delta M_z = \pm 1. \quad (4.108)$$

Wegen der Nebenbedingung (4.106) sind $D_1, D_2 \in \mathbb{Z}$. Die zu $\mathcal{G}_{\sigma,\sigma}^t$ korrespondierende statische Skalendimension $d_{\sigma,\sigma}^t$ ist gegeben durch, vgl. Abbildung (4.3) (c):

$$d_{\sigma,\sigma}^t = \Delta_1^+ + \Delta_1^- + \Delta_2^+ + \Delta_2^- = \left\{ \frac{Z_{22} - Z_{21}}{2 \det Z} \right\}^2 + \left\{ \frac{Z_{11} - Z_{12}}{2 \det Z} \right\}^2. \quad (4.109)$$

Zudem findet man die schon aus den Betrachtungen zu der Phase B1 bekannten Anregungen, die die Magnetisierung um $\Delta M^z = \pm 1$ verändern, indem sie Spinflips mit Störstellenerzeugung bzw. -vernichtung kombinieren. Bei vorgegebener Anzahl von Spinflips ΔN_\downarrow ergeben sich die Quantenzahlen dieser Anregungen zu:

$$\begin{aligned} \Delta N_1 &= -2\Delta M^z - 3\Delta N_\downarrow = \mp 2 - 3\Delta N_\downarrow, \quad \Delta N_2 = \Delta N_\downarrow, \\ D_1 \equiv D_2 &\equiv \frac{\mp 2 - 3\Delta N_\downarrow + \Delta N_\downarrow}{2} \pmod{1} \equiv 0 \pmod{1}. \end{aligned} \quad (4.110)$$

Abschließend soll der Einfluß des äußeren Magnetfeldes H auf die kritischen Eigenschaften in dieser Phase untersucht werden. Der Wechselwirkungsterm \mathcal{H}_{WW} ist ähnlich wie in der Phase B1 mit $\Delta N_1 = \Delta N_2 = 0$ sowie $D_1, D_2 \in \mathbb{Z}$ gegeben durch:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{WW} &= H \int dx \hat{S}^z(x) \\ &\propto H \sum_{D_1, D_2} \int dx \cos[2(D_1 \mathcal{P}_{\mathcal{F},1} + D_2 \mathcal{P}_{\mathcal{F},2})x] \cos \beta_1 \phi_1(x) \cos \beta_2 \phi_2(x). \end{aligned} \quad (4.111)$$

Dieser Term modifiziert das Tieftemperaturverhalten des Systems nur dann, wenn die beiden Anregungsmoden kommensurabel sind, $(D_1 \mathcal{P}_{\mathcal{F},1} + D_2 \mathcal{P}_{\mathcal{F},2}) = 0$, und die statische Skalendimension d kleiner als Zwei ist. Anhand der Abbildung (4.3) (d) läßt sich ablesen, daß die

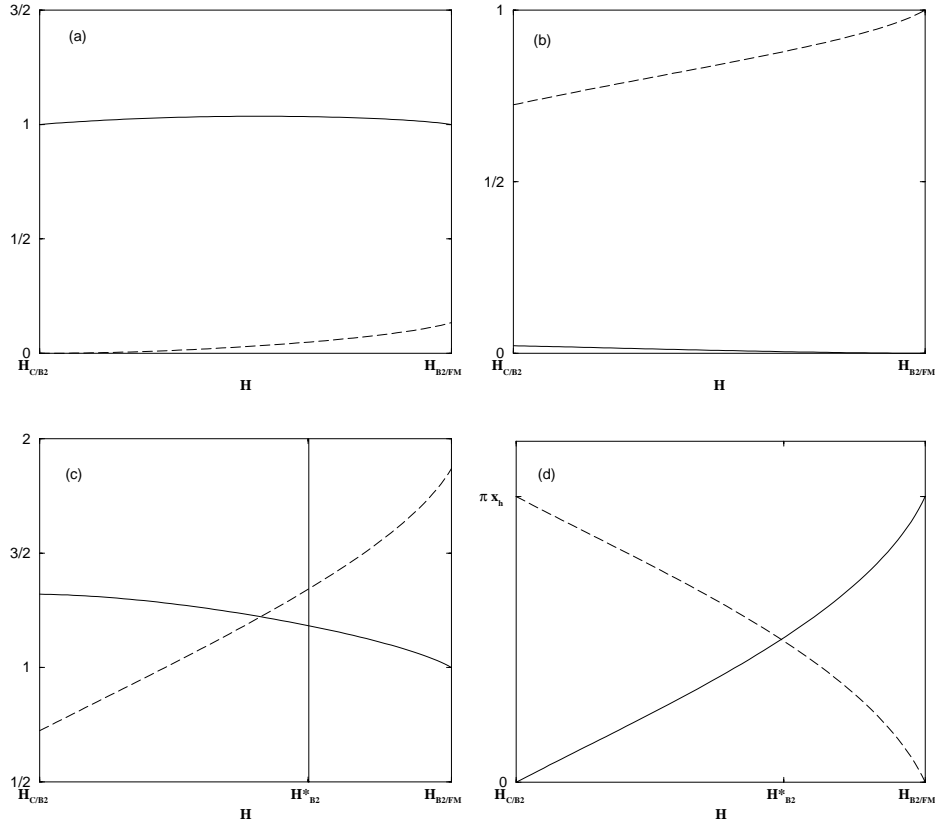


Abbildung 4.3. Konforme Dimensionen $2\Delta_1$ (durchgezogene Linien) und $2\Delta_2$ (gestrichelte Linien) der longitudinalen Spin-Spin-Korrelationsfunktion bei konstanter Störstellenkonzentration $x_h = 0.2$ für (a) : $D_1 = \pm 1, D_2 = 0$, (b) : $D_1 = 0, D_2 = \pm 1$ sowie (c) : $D_1 = -D_2 = \pm 1$ vs. äußeres Magnetfeld H . In (d) sind die entsprechenden Fermi-Impulse $\mathcal{P}_{\mathcal{F},1}$ (durchgezogen) und $\mathcal{P}_{\mathcal{F},2}$ (gestrichelt) für $x_h = 0.2$ dargestellt.

Kommensurabilitätsbedingung für drei unterschiedliche Werte des äußeren Magnetfeldes H erfüllt werden kann: $H = H_{C/B2}$ ($D_1 \in \mathbb{Z}, D_2 = 0$), $H = H_{B2}^*$ ($D_1 = -D_2$) und $H_{B2/FM}$ ($D_1 = 0, D_2 \in \mathbb{Z}$).

Für den Fall $H = H_{B2}^*$ sieht man anhand der Abbildung (4.3) (c), daß die minimale Skalendimension $d = 2\Delta_1(D_1 = -D_2 = \pm 1) + 2\Delta_2(D_1 = -D_2 = \pm 1)$ größer als zwei und damit der Störterm \mathcal{H}_{WW} irrelevant ist. Die effektive Tieftemperaturtheorie bleibt damit eine zwei-komponentige TOMONAGA-LUTTINGER-Flüssigkeit.

Die minimale Skalendimension $d_{C/B2}$ an der Phasengrenze C/B2 ergibt sich, wenn man $D_1 = \pm 1$ ($D_2 = 0$) setzt. Ausgehend von der Abbildung (4.3) (a) läßt sich erkennen, daß für $H \rightarrow H_{C/B2}$ die konforme Dimension $2\Delta_2$ gegen Null strebt, während $2\Delta_1 = 1$ wird. Somit ist der Wechselwirkungsterm (4.111)

$$\mathcal{H}_{WW} \propto H \int dx \cos \beta_1 \phi_1(x) \quad (4.112)$$

wegen $d_{C/B2} = 2\Delta_1 + 2\Delta_2 = 1 < 2$ ein relevanter Operator, d.h. ϵ_1 wird massiv. Die

Tieftemperatureigenschaften der Anregungsmoden ϵ_1 können daher in der Nähe von C/B2 mit Hilfe eines SINE-GORDON-Modells beschrieben werden [4]:

$$S[\phi_1] = \int dx^2 \left[\frac{v_1}{2} (\nabla \phi_1(x))^2 + H \cos \beta_1 \phi_1(x) \right]. \quad (4.113)$$

Somit ist der auftretende Phasenübergang C/B2 vollständig klassifiziert. Da bei $H = H_{C/B2}$ ein Magnetisierungsplateau auftritt, läßt sich ϵ_1 mit den Spinfreiheitsgraden des Systems identifizieren, während ϵ_2 zu den Ladungsfreiheitsgraden korrespondiert.

Das Verhalten des Phasenübergangs B2/FM wird durch die statische Skalendimension $d_{B2/FM}$ bestimmt, die man für $D_1 = 0$ und $D_2 = \pm 1$ erhält. In diesem Fall geht für $H \rightarrow H_{B2/FM}$ die konforme Dimension $2\Delta_1$ gegen Null und $2\Delta_2$ gegen Eins, vgl. Abbildung (4.3) (b). Daher ist der Störterm (4.111) gegeben durch

$$\mathcal{H}_{WW} \propto H \int dx \cos \beta_2 \phi_2(x) \quad (4.114)$$

und die Mode ϵ_2 wird wegen $d_{B2/FM} = 1 < 2$ massiv. Die effektive Feldtheorie entspricht demnach bei $H = H_{B2/FM}$ einem SINE-GORDON-Modell für die mit den Spinfreiheitsgraden verknüpfte ϵ_2 -Mode und einer freien bosonischen Feldtheorie für die Ladungsfreiheitsgrade ϵ_1 .

Interessant ist, daß die beiden Anregungsmoden in der Phase B2 ihr physikalisches Verhalten in Abhängigkeit von dem äußeren Magnetfeld H drastisch verändern: So wird ϵ_1 (ϵ_2) für $H \simeq H_{C/B2}$ mit den magnetischen (Ladungs-) und für $H \simeq H_{B2/FM}$ mit den Ladungs- (magnetischen) Anregungen identifiziert. Dies zeigt, daß die beiden Phasen keineswegs voneinander unabhängig sind, sondern über die *Dressed-Charge-Matrix* Z miteinander gekoppelt sind, ein Phänomen, daß man bereits vom HUBBARD-Modell in einem äußeren Magnetfeld H kennt [13].

KAPITEL 5

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden die statischen und dynamischen Tieftemperatureigenschaften einer mit frei beweglichen Spin $S = 1/2$ -Störstellen dotierten, antiferromagnetischen Spin $S = 1$ -Kette in einem äußeren Magnetfeld untersucht. Bei diesem integrablen, magnetischen System handelt es sich um ein verallgemeinertes, supersymmetrisches t - J -Modell, das zwischen dem isotropen $S = 1/2$ -HEISENBERG-Modell bei vollständiger Dotierung und der exakt lösbaren $S = 1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette im Falle verschwindender Störstellenkonzentration interpoliert.

Die dotierte Spin $S = 1$ -Kette ließ sich ausgehend von einer zu der *atypischen* $[1]_+$ -Darstellung der graduierten LIE-Algebra $gl(2|1)$ korrespondierenden, $gl(2|1)$ -invarianten Lösung der YANG-BAXTER-Gleichung mit Hilfe der Quanten-Inversen-Streumethode und des algebraischen BETHE-Ansatzes konstruieren und lösen.

Die Integrabilität des Modells erlaubt eine vollständige Klassifikation der niederenergetischen Anregungen und gewährt einen Einblick in die Mechanismen und Strukturen eines eindimensionalen, stark wechselwirkenden Systems bei tiefen Temperaturen. Mittels des BETHE-Ansatzes wurde zunächst das Spektrum der niederenergetischen Anregungen abgeleitet, d.h. die thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen für die als *Dressed-Energies* bezeichneten Quasiteilchenbänder. Man fand, daß für beliebige Störstellenkonzentration und äußere Magnetfelder maximal drei dieser Anregungsmoden masselos werden können. Mit Hilfe des niederenergetischen Spektrums ließ sich das Tieftemperatur-Phasendiagramm der dotierten Spin $S = 1$ -Kette bestimmen. Dabei wurden die Phasen bzgl. der Anzahl der tatsächlich auftretenden masselosen Moden sowie deren physikalischen Eigenschaften charakterisiert. Für endliche Dotierung existieren fünf unterschiedliche Phasen: Die zwei Plateauphasen FM und C, in denen die magnetischen Anregungen eine Energielücke aufweisen und nur die Ladungsmoden masselos ist, die zwei TOMONAGA-LUTTINGER-Phasen B1 und B2, charakterisiert durch zwei masselose Moden assoziiert mit den magnetischen und Ladungsfreiheitsgraden des Systems, und eine Phase 3M, in der alle drei Anregungsmoden kritisch sind. Die Phasengrenzen ließen sich im allgemeinen nur numerisch bestimmen: Für kleine Störstellenkonzentrationen konnten sie jedoch teilweise mit Hilfe einer TAYLOR-Entwicklung näherungsweise analytisch berechnet werden.

Im $SU(2)$ -invarianten Grenzfall (verschwindendes äußeres Magnetfeld) konnte gezeigt werden, daß das Modell Spin-Ladungstrennung aufweist und sich effektiv durch eine TOMONAGA-LUTTINGER-Flüssigkeit beschreiben läßt. Bei kleinen, äußeren Magnetfeldern ergab sich für den magnetischen Sektor folgendes Bild: Zu der Tieftemperaturentwicklung der freien Energiedichte tragen die beiden masselosen, magnetischen Moden bei und man findet ein TOMONAGA-LUTTINGER-ähnliches Verhalten. Allerdings sind die Parameter c_1 und c_2 , die normalerweise als die zentralen Ladungen der zugrundeliegenden

VIRASORO-Algebren aufgefaßt werden, diesmal reellwertige Funktionen in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration, die der Summenregel $c_1 + c_2 = 2$ genügen. Es konnte gezeigt werden, daß sich c_1 und c_2 nur in besonderen Grenzfällen als die zentralen Ladungen zweier unitärer, konformer Feldtheorien interpretieren lassen. So ist die effektive Feldtheorie der beiden magnetischen Moden bei verschwindender (vollständiger) Dotierung gerade ein $SU(2)_2(SU(2)_1)$ -WZW-Modell und ein minimales Modell ($SU(2)_1$ -WZW-Modell), in Übereinstimmung mit dem bekannten kritischen Verhalten der integrablen $S=1$ -TAKHTAJAN-BABUJIAN-Kette und des isotropen $S=1/2$ -HEISENBERG-Modell.

Desweiteren wurde die Plateauphase C näher untersucht. Soweit bekannt, ist die dotierte Spin $S=1$ -Kette das erste integrable Modell, bei dem ein nicht-triviales Plateau in der Magnetisierungskurve beobachtet wurde. Dessen Lage läßt sich im Gegensatz zu den aufgrund von topologischen Überlegungen induzierten Plateaus in verschiedenen, verallgemeinerten Spinsystemen in Abhängigkeit von der Störstellenkonzentration kontinuierlich verändern. Das lineare Verhalten der Magnetisierungskurve am Phasenübergang C/B2 ließ sich analytisch verifizieren. Diese anomale Eigenschaft — im allgemeinen erwartet man einen Übergang zwischen einer kommensurablen und einer inkommensurablen Phase, was zu einem Quadratwurzelverhalten in der Magnetisierungskurve führt — wird dadurch erklärt, daß die beiden masselosen Moden in der Phase B2 nicht vollständig entkoppelt sind, sondern über die *Dressed-Charge-Matrix* parametrisch von dem äußeren Magnetfeld und der Störstellenkonzentration abhängen.

Da im Rahmen des BETHE-Ansatzes die Eigenzustände nur prinzipiell zugänglich sind, lassen sich die dynamischen Eigenschaften des Modells nur indirekt bestimmen. Dazu wurden in dieser Arbeit die $1/L$ -Korrekturen der BETHE-Ansatz-Gleichungen mit Hilfe eines *Finite-Size-Scaling* berechnet, mit denen man unter Verwendung von Vorhersagen der konformen Feldtheorie die zugrundeliegenden, effektiven Feldtheorien in den jeweiligen Tieftemperaturphasen identifizieren kann. Dies ermöglichte es einem bei konstanter Störstellenkonzentration die elementaren magnetischen Anregungen, das asymptotische Verhalten von Korrelationsfunktionen für große Abstände und Zeiten sowie die Skalendimension und den konformen Spin der physikalischen Operatoren in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld zu bestimmen. Außerdem ließen sich damit die Phasenübergänge von den TOMONAGA-LUTTINGER-Phasen B1 und B2 hin zu den beiden Plateauphasen C und FM untersuchen und klassifizieren. Als effektive Feldtheorie für die Ladungsfreiheitsgrade erhält man ein freies Boson, während die magnetischen Freiheitsgrade effektiv durch ein SINE-GORDON-Modell beschrieben werden.

Gegenstand weiterführender Untersuchungen könnte die Berechnung von Korrelationsfunktionen mittels der Formfaktormethode sein. Im Rahmen dieser Methode lassen sich die nicht-universellen Amplituden bestimmen, die bei der Entwicklung der physikalischen Operatoren nach primären Feldern auftreten. Interessant wäre auch, ob sich das von F. GÖHMANN und V. E. KOREPIN in [33] gefundene Verfahren zur Lösung des Quanten-Inversen-Streuproblems auf die dotierte Spin $S=1$ -Kette anwenden läßt bzw. ein ähnliches Verfahren entwickelt werden kann. Damit könnten die Operatoren durch Elemente der Quanten-Monodromiematrix ersetzt und eine Integraldarstellungen für Korrelationsfunktionen abgeleitet werden.

Teile dieser Arbeit wurden aus Prioritätsgründen bereits in [47] veröffentlicht.

ANHANG A

Die Superalgebra $gl(2|1)$

In diesem Anhang sollen die grundlegenden Eigenschaften der Algebra $gl(2|1)$ zusammengefaßt werden [62, 91, 92, 93]. Wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, ist die $gl(2|1)$ eine Super-LIE-Algebra. Ihre neun Generatoren, von denen fünf gerade (bosonisch: $\hat{1}$, \hat{B} , \hat{S}^z , \hat{S}^+ sowie \hat{S}^-) und vier ungerade (fermionisch: \hat{V}^+ , \hat{V}^- , \hat{W}^+ sowie \hat{W}^-) sind, genügen folgenden Kommutator- und Antikommutatorrelationen, auch Superkommutatorrelationen genannt [45, 62]:

$$\begin{aligned} [\hat{S}^z, \hat{S}^\pm] &= \pm \hat{S}^\pm, \quad [\hat{S}^+, \hat{S}^-] = 2 \hat{S}^z, \\ [\hat{B}, \hat{S}^\pm] &= [\hat{B}, \hat{S}^z] = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} [\hat{S}^z, \hat{V}^\pm] &= \pm \frac{1}{2} \hat{V}^\pm, \quad [\hat{S}^\pm, \hat{V}^\pm] = 0, \quad [\hat{S}^\mp, \hat{V}^\pm] = \hat{V}^\mp, \\ [\hat{B}, \hat{V}^\pm] &= \frac{1}{2} \hat{V}^\pm, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} [\hat{S}^z, \hat{W}^\pm] &= \pm \frac{1}{2} \hat{W}^\pm, \quad [\hat{S}^\pm, \hat{W}^\pm] = 0, \quad [\hat{S}^\mp, \hat{W}^\pm] = \hat{W}^\mp, \\ [\hat{B}, \hat{W}^\pm] &= -\frac{1}{2} \hat{W}^\pm, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \{\hat{V}^\pm, \hat{V}^\pm\} &= \{\hat{V}^\pm, \hat{V}^\mp\} = \{\hat{W}^\pm, \hat{W}^\pm\} = \{\hat{W}^\pm, \hat{W}^\mp\} = 0, \\ \{\hat{V}^\pm, \hat{W}^\pm\} &= \pm \frac{1}{2} \hat{S}^\pm, \quad \{\hat{V}^\pm, \hat{W}^\mp\} = \frac{1}{2} (-\hat{S}^z \pm \hat{B}). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Man erkennt, daß der gerade Anteil der Superalgebra eine gewöhnliche $u(1) \oplus su(2)$ LIE-Algebra ist. Dies bedeutet, daß man die gesamte Superalgebra $gl(2|1)$ nach den irreduziblen Darstellungen des geraden Teils klassifizieren kann. Das Gewichtsdiagramm der $gl(2|1)$ läßt sich direkt aus den Superkommutatorrelationen ableiten [62]: Die bosonischen Operatoren \hat{S}^\pm sowie \hat{S}^z bzw. \hat{B} bilden ein $su(2)$ -Triplett bzw. Singulett mit der Ladung $b = 0$, und der fermionische Anteil enthält seinerseits zwei unterschiedliche $su(2)$ -Doubletts, \hat{V}^\pm mit Ladung $b = 1/2$ und \hat{W}^\pm mit $b = -1/2$. Mit den obigen Superkommutatorrelationen und dem dazu gehörigen Wurzeldiagramm kann man zeigen, daß sich jede Darstellung der $gl(2|1)$ in verschiedene $su(2)$ -Multipletts mit festem Eigenwert b zerlegen läßt, d.h. jede Darstellung läßt sich mit Hilfe des \hat{S}^2 - und \hat{B} -Eigenwerts s bzw. b charakterisieren. Allerdings zeigt sich bei dieser Klassifizierung auch, daß zwei völlig unterschiedliche Arten von irreduziblen Darstellungen der $gl(2|1)$ existieren, nämlich die sogenannten *typischen* und *atypischen* Darstellungen [62].

Eine irreduzible, *typische* Darstellung wird durch $[b; s]$ mit $b \neq \pm s$ eindeutig charakterisiert und kann in die vier $su(2)$ -Multipletts (b, s) , $(b - 1/2, s - 1/2)$, $(b + 1/2, s - 1/2)$ sowie $(b, s - 1)$ zerlegt werden. Beachtet man die \mathbb{Z}_2 -Graduierung der Superalgebra $gl(2|1)$, so

muß den Zuständen noch ein entsprechenden Grad bzw. eine Parität zugeordnet werden, d.h. man muß entscheiden, welche der jeweiligen Zustände bosonisch (gerade) und welche fermionisch (ungerade) sind. Wegen der Superkommutatorrelationen der $gl(2|1)$ kann diese Zuordnung jedoch nicht mehr willkürlich vorgenommen werden, sondern die Vektoren des (b, s) - und $(b, s - 1)$ -Multipletts müssen entweder alle bosonisch (Grad Null) oder alle fermionisch (Grad Eins) sein, während die Zustände der beiden übrigen Multipletts $(b - 1/2, s - 1/2)$ und $(b + 1/2, s - 1/2)$ dann alle Grad Eins oder Null besitzen müssen.

Setzt man dagegen $b = \pm s$, so erhält man die sogenannten *atypischen* Darstellungen der $gl(2|1)$, die *a priori* nicht mehr unbedingt irreduzibel sind [62]. Im folgenden sollen nur noch die in dieser Arbeit benötigten $(4s + 1)$ -dimensionalen irreduziblen Darstellungen $[s]_+$ der $gl(2|1)$ weiter untersucht werden. Diese sind dadurch charakterisiert, daß der jeweilige Zustandsraum durch die beiden $u(1) \otimes su(2)$ Multipletts (s, s) und $(s + 1/2, s - 1/2)$ aufgespannt wird. Das Tensorprodukt von $[s]_+$ mit $[s']_+$ läßt sich in seine irreduziblen Komponenten aufspalten [45]

$$\begin{aligned} [s]_+ \otimes [s']_+ &= [s + s']_+ \oplus [s + s' + \frac{1}{2}; s + s' - \frac{1}{2}] \oplus [s + s' + \frac{1}{2}; s + s' - \frac{3}{2}] \\ &\oplus \dots \oplus [s + s' + \frac{1}{2}; |s - s'| + \frac{1}{2}], \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

welche man mittels des quadratischen CASIMIR-Operators [45]

$$\hat{K}_2 = \hat{S}^2 - \hat{B}^2 - \hat{W}^- \hat{V}^+ + \hat{W}^+ \hat{V}^- - \hat{V}^- \hat{W}^+ + \hat{V}^+ \hat{W}^- \quad (\text{A.6})$$

eindeutig identifizieren kann, da \hat{K}_2 auf $[s]_+$ den Eigenwert 0 und auf $[b; s]$ den Eigenwert $(s^2 - b^2)$ annimmt.

Als Spezialfall von $[s]_+$ soll hier zunächst die fundamentale, dreidimensionale Darstellung $[\frac{1}{2}]_+$ betrachtet werden, die man zur Konstruktion des supersymmetrischen t - J -Modells benötigt. Da $[\frac{1}{2}]_+$ neben dem $su(2)$ -Dublett $(1/2, 1/2)$ nur noch das Singulett $(1, 0)$ enthält, kann man als Basis die drei Vektoren verwenden:

$$\begin{aligned} \text{Dublett} &: e_3 = |\uparrow\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \quad e_2 = |\downarrow\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ \text{Singulett} &: e_1 = |0\rangle = |1, 0, 0\rangle. \end{aligned}$$

Ordnet man dem Singulett den Grad Null und dem Dublett den Grad Eins zu, so ist der Darstellungsraum $\mathcal{D}_{[\frac{1}{2}]_+}$ isomorph zu $\mathcal{V}^{(1|2)}$. In dieser Basis lassen sich die bosonischen Operatoren der $gl(2|1)$ durch die Matrizen [62]

$$\begin{aligned} \hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^z &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \hat{B}_{[\frac{1}{2}]_+} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{[\frac{1}{2}]_+}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

bzw. die fermionischen Operatoren durch

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{V}_{[\frac{1}{2}]_+}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \hat{W}_{[\frac{1}{2}]_+}^+ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{W}_{[\frac{1}{2}]_+}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

darstellen.

Zur Konstruktion der dotierten Spin $S = 1$ -Kette benötigt man neben der fundamentalen, dreidimensionalen $[\frac{1}{2}]_+$ -Darstellung für den Hilfsraum $\mathcal{V}^{(1|2)}$ die fünf-dimensionale $[1]_+$ -Darstellung. Da $[1]_+$ nur aus dem $su(2)$ -Triplett $(1, 1)$ sowie dem $su(2)$ -Dublett $(3/2, 1/2)$ besteht, kann man die Vektoren

$$\begin{aligned}
 \text{Triplett} \quad &: e_1 = |\uparrow\uparrow\rangle = |1, 1, 1\rangle, \quad e_2 = |\Rightarrow\rangle = |1, 1, 0\rangle, \quad e_3 = |\downarrow\downarrow\rangle = |1, 1, -1\rangle, \\
 \text{Dublett} \quad &: e_4 = |\uparrow\rangle = |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \quad e_5 = |\downarrow\rangle = |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle
 \end{aligned}$$

als Basis für den Darstellungsraum $\mathcal{D}_{[1]_+}$ verwenden. Für die folgende Graduierung $[1] = [2] = [3] = 0$ und $[4] = [5] = 1$ ist dann $\mathcal{D}_{[1]_+}$ gerade isomorph zum lokalen HILBERT-Raum \mathcal{H}_n der dotierten Spin $S = 1$ -Kette.

ANHANG B

Finite-Size-Korrekturen

Da bei der Berechnung der *Finite-Size*-Korrekturen zur Energie E einige Subtilitäten auftreten, soll die Formel (4.60) an dieser Stelle ausführlich hergeleitet werden [45]. Ausgehend von der Gleichung (4.47) erhält man unter Anwendung der EULER-MACLAURIN-Summenformel (4.51) das folgende Ergebnis für E :

$$\begin{aligned}
 E &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{N_n} \{nH + \epsilon_n^{(0)}(x_l^n)\} - \sum_{\alpha=1}^{N_h} \left\{ \mu + \frac{H}{2} \right\} \\
 &= \sum_{\alpha=0}^2 \sum_{l=1}^{N_\alpha} \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x) \\
 &= L \sum_{\alpha=0}^2 \int_\alpha dx \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x) \sigma_{\alpha,L}(x) - \frac{1}{24L} \sum_{\alpha=0}^2 \frac{\partial_x \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x)}{\sigma_{\alpha,L}(x)} \Big|_\alpha. \tag{B.1}
 \end{aligned}$$

Dabei wurde $\tilde{\epsilon}_0^{(0)}(x) = -\mu - H/2$ sowie $\tilde{\epsilon}_n^{(0)} = nH + \epsilon_n^{(0)}(x)$, $n = 1, 2$ gesetzt und berücksichtigt, daß für die *Finite-Size*-Korrekturen nur die drei masselosen Anregungsmoden $\epsilon_0 := \kappa$, ϵ_1 und ϵ_2 relevant sind. Ersetzt man in der obigen Gleichung $\sigma_{\alpha,L}$ mit Hilfe von (4.58), wobei alle Beiträge zur Ordnung $\mathcal{O}(1/L^2)$ vernachlässigt werden können, so ergibt sich das folgende Resultat für die Energie E (B.1):

$$\begin{aligned}
 E &= L \sum_\alpha \int_\alpha dx \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x) \sigma_\alpha(x; X^\pm) - \frac{1}{24L} \sum_\alpha \frac{\partial_x \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x)}{\sigma_\alpha(x; X^\pm)} \Big|_\alpha \\
 &\quad - \sum_{\alpha,\beta} \int_\alpha dx \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x) \left\{ \frac{t_{\alpha\beta}^+(x)}{\sigma_\beta(X_\beta^+; X^\pm)} + \frac{t_{\alpha\beta}^-(x)}{\sigma_\beta(X_\beta^-; X^\pm)} \right\}. \tag{B.2}
 \end{aligned}$$

Für die weiteren Umformungen von E benötigt man neben den thermodynamischen BETHE-Ansatz-Gleichungen (3.54) für die *Dressed-Energies* bei $T = 0$:

$$\epsilon_\alpha(x) = \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x) - \sum_\beta \hat{T}_{\alpha\beta} * \epsilon_\beta(x|X_\beta^\pm) \tag{B.3}$$

mit $\epsilon_\alpha(X_\alpha^\pm) = 0$ auch noch:

$$t_{\alpha\beta}^\pm(x) = \pm T'_{\alpha\beta}(x - X_\beta^\pm) - \sum_\gamma \hat{T}_{\alpha\gamma} * t_{\gamma\beta}^\pm(x|X_\gamma^\pm). \tag{B.4}$$

Wegen der Symmetrieeigenschaften des Integrationskerns $T_{\alpha\beta}(x) = T_{\beta\alpha}(x) = T_{\alpha\beta}(-x)$ läßt sich der Ausdruck $\partial_x \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x)$ in Gleichung (B.2) ersetzen durch:

$$\begin{aligned}
& \pm \partial_{X_\alpha^\pm} (\epsilon_\alpha(X_\alpha^\pm) - \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(X_\alpha^\pm)) \\
= & \mp \partial_{X_\alpha^\pm} \sum_\beta \int_\beta dx T_{\alpha\beta}(X_\alpha^\pm - x) \epsilon_\beta(x) \\
= & -T_{\alpha\alpha}(0) \epsilon_\alpha(X_\alpha^\pm) \pm \sum_\beta \int_\beta dx \epsilon_\beta(x) T'_{\beta\alpha}(x - X_\alpha^\pm) \\
= & \sum_\beta \int_\beta dx \epsilon_\beta(x) \left\{ t_{\beta\alpha}^\pm(x) + \sum_\gamma \hat{T}_{\beta\gamma} * t_{\gamma\alpha}^\pm(x | X_\gamma^\pm) \right\} \\
= & \sum_\beta \int_\beta dx \epsilon_\beta(x) t_{\beta\alpha}^\pm(x) + \sum_\gamma \int_\gamma dx' t_{\gamma\alpha}^\pm(x') \sum_\gamma \hat{T}_{\gamma\beta} * \epsilon_\beta(x' | X_\beta^\pm) \\
= & \sum_\beta \int_\beta dx \epsilon_\beta(x) t_{\beta\alpha}^\pm(x) + \sum_\gamma \int_\gamma dx t_{\gamma\alpha}^\pm(x) \{ \tilde{\epsilon}_\gamma^{(0)}(x) - \epsilon_\gamma(x) \} \\
= & \sum_\beta \int_\beta dx \tilde{\epsilon}_\beta^{(0)}(x) t_{\beta\alpha}^\pm(x). \tag{B.5}
\end{aligned}$$

Damit erhält man Gleichung (4.60) für die Energie (B.2):

$$E = L \sum_\alpha \int_\alpha dx \tilde{\epsilon}_\alpha^{(0)}(x) \sigma_\alpha(x; X^\pm) - \frac{1}{24L} \sum_\alpha \frac{\partial_x \epsilon_\alpha(x)}{\sigma_\alpha(x; X^\pm)} \Big|_\alpha. \tag{B.6}$$

Als nächstes soll die JAKOBI-Determinante J berechnet werden, die bei der Transformation $\{X_\alpha^\pm\} \rightarrow \{N_\alpha, D_\alpha\}$ auftritt und benötigt wird, um den Ausdruck (4.68) für die Energiedichte $\varepsilon(X^\pm)$ aus (4.63) abzuleiten. Ausgangspunkt für die Berechnung von J sind (4.54) und (4.54):

$$\begin{aligned}
n_\alpha = \frac{N_\alpha}{L} &= \int_\alpha dx \sigma_{\alpha,L}(x), \\
d_\alpha = \frac{D_\alpha}{L} &= \frac{1}{2} \left(\int_{X_\alpha^+}^\infty - \int_{-\infty}^{X_\alpha^-} \right) dx \sigma_{\alpha,L}(x). \tag{B.7}
\end{aligned}$$

Die Dichten $\sigma_{\alpha,L}(x)$ lassen sich mit Hilfe von (4.56) durch $\sigma_\alpha(x; X^\pm)$ ersetzen, wobei die Beiträge der Ordnung $(1/L)^2$ zu n_α und d_α vernachlässigt werden können, da die inner Energie E des Modells (B.1) mit Hilfe der EULER-MACLAURIN-Summenformel nur bis zur Ordnung $1/L$ exakt entwickelt wurde. Für die Ableitung von n_α und d_α bezüglich der FERMI-Punkte X_α^\pm ergibt sich aus (B.7):

$$\begin{aligned}
\pm \partial_{X_\beta^\pm} n_\alpha &= \delta_{\alpha\beta} \sigma_\beta(X_\beta^\pm; X^\pm) \pm \int_\alpha dx \partial_{X_\beta^\pm} \sigma_\alpha(x; X^\pm), \\
\pm \partial_{X_\beta^\pm} d_\alpha &= \mp \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \sigma_\beta(X_\beta^\pm; X^\pm) \pm \frac{1}{2} \left(\int_{X_\alpha^+}^\infty - \int_{-\infty}^{X_\alpha^-} \right) dx \partial_{X_\beta^\pm} \sigma_\alpha(x; X^\pm). \tag{B.8}
\end{aligned}$$

Die Funktionen $g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm})$ sind definiert als

$$g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm}) = \pm \frac{\partial_{X_{\beta}^{\pm}} \sigma_{\alpha}(x; X^{\pm})}{\sigma_{\beta}(X_{\beta}^{\pm}; X^{\pm})} \quad (\text{B.9})$$

und genügen wegen der Störstellen- und Stringdichten (4.59)

$$\sigma_{\alpha}(x; X^{\pm}) = \sigma_{\alpha}^{(0)}(x) - \sum_{\beta} \hat{T}_{\alpha\beta} * \sigma_{\beta}(x; X^{\pm} | X_{\beta}^{\pm}) \quad (\text{B.10})$$

bzw. wegen deren differentieller Form

$$\begin{aligned} \pm \partial_{X_{\beta}^{\pm}} \sigma_{\alpha}(x; X^{\pm}) &= -T_{\alpha\beta}(x - X_{\beta}^{\pm}) \sigma_{\beta}(X_{\beta}^{\pm}; X^{\pm}) \\ &\mp \sum_{\gamma} \hat{T}_{\alpha\gamma} * \partial_{X_{\beta}^{\pm}} \sigma_{\gamma}(x; X^{\pm} | X_{\gamma}^{\pm}) \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

der Integralgleichung

$$g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm}) = -T_{\alpha\beta}(x - X_{\beta}^{\pm}) - \sum_{\gamma} \hat{T}_{\alpha\gamma} * g_{\gamma\beta}^{\pm}(x; X^{\pm} | X_{\gamma}^{\pm}). \quad (\text{B.12})$$

Damit lassen sich die Gleichungen (B.8) auch schreiben als:

$$\begin{aligned} \pm \partial_{X_{\beta}^{\pm}} n_{\alpha} &= \sigma_{\beta}(X_{\beta}^{\pm}; X^{\pm}) \left\{ \delta_{\alpha\beta} + \int_{\alpha} dx g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm}) \right\} \\ \pm \partial_{X_{\beta}^{\pm}} d_{\alpha} &= -\frac{1}{2} \sigma_{\beta}(X_{\beta}^{\pm}; X^{\pm}) \left\{ \pm \delta_{\alpha\beta} - \left(\int_{X_{\alpha}^{+}}^{\infty} - \int_{-\infty}^{X_{\alpha}^{-}} \right) dx g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm}) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Entwickelt man nun die Integralgleichung (B.12) für $g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm})$ und die durch

$$\zeta_{\alpha\beta}(x; X^{\pm}) = \delta_{\alpha\beta} - \sum_{\gamma} \int_{\gamma} dx' \zeta_{\alpha\gamma}(x'; X^{\pm}) T_{\gamma\beta}(x - x') \quad (\text{B.14})$$

definierte *Dressed-Charge-Matrix* ζ jeweils in eine VON NEUMANN-Reihe, also

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm}) & \\ = & -T_{\alpha\beta}(x - X_{\beta}^{\pm}) + \sum_{\gamma_1} \int_{\gamma_1} dx_1 T_{\alpha\gamma_1}(x - x_1) T_{\gamma_1\beta}(x_1 - X_{\beta}^{\pm}) \\ & - \sum_{\gamma_1, \gamma_2} \int_{\gamma_1} \int_{\gamma_2} dx_1 dx_2 T_{\alpha\gamma_1}(x - x_1) T_{\gamma_1\gamma_2}(x_1 - x_2) T_{\gamma_2\beta}(x_2 - X_{\beta}^{\pm}) \pm \dots \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

bzw.

$$\begin{aligned} \zeta_{\alpha\beta}(X; X^{\pm}) & \\ = & \delta_{\alpha\beta} - \int_{\alpha} dx T_{\alpha\beta}(x - X) + \int_{\alpha} dx \sum_{\gamma_1} \int_{\gamma_1} dx_1 T_{\alpha\gamma_1}(x - x_1) T_{\gamma_1\beta}(x_1 - X) \\ & - \int_{\alpha} dx \sum_{\gamma_1, \gamma_2} \int_{\gamma_1} \int_{\gamma_2} dx_1 dx_2 T_{\alpha\gamma_1}(x - x_1) T_{\gamma_1\gamma_2}(x_1 - x_2) T_{\gamma_2\beta}(x_2 - X_{\beta}^{\pm}) \pm \dots, \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

so erkennt man folgenden Zusammenhang zwischen $Z_{\alpha\beta}^{\pm} = \zeta_{\alpha\beta}(X_{\beta}^{\pm}; X^{\pm})$ und $g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm})$:

$$\int_{\alpha} dx g_{\alpha\beta}^{\pm}(x; X^{\pm}) = \pm \{ \zeta_{\alpha\beta}(X_{\beta}^{\pm}; X^{\pm}) - \zeta_{\alpha\beta}(\pm\infty; X^{\pm}) \} = \pm \{ Z_{\alpha\beta}^{\pm} - \delta_{\alpha\beta} \}. \quad (\text{B.17})$$

Entwickelt man ferner auch die Integralgleichung für $\zeta'_{\alpha\beta}(x; X^{\pm})$

$$\begin{aligned} \zeta'_{\alpha\beta}(x; X^{\pm}) &= \partial_x \zeta_{\alpha\beta}(x; X^{\pm}) \\ &= - \sum_{\gamma} \int_{\gamma} dx' \zeta_{\alpha\gamma}(x; X^{\pm}) \partial_x T_{\gamma\beta}(x - x') \\ &= \sum_{\gamma} \int_{\gamma} dx' \zeta_{\alpha\gamma}(x; X^{\pm}) \partial_{x'} T_{\gamma\beta}(x - x') \\ &= \sum_{\gamma, i=\pm 1} i Z_{\alpha\gamma}^i T_{\beta\gamma}(x - X_{\gamma}^i) - \sum_{\gamma} \int_{\gamma} dx' \zeta'_{\alpha\gamma}(x; X^{\pm}) T_{\gamma\beta}(x - x') \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

in eine VON NEUMANN-Reihe und vergleicht diese mit (B.20), so erhält man zwischen $Z_{\alpha\beta}^{\pm}$ und $g_{\alpha\beta}^{\pm}(x)$ eine weitere Beziehung:

$$\zeta'_{\alpha\beta}(x; X^{\pm}) = - \sum_{\gamma} \{ Z_{\alpha\gamma}^+ g_{\beta\gamma}^+(x; X^{\pm}) - Z_{\alpha\gamma}^- g_{\beta\gamma}^-(x; X^{\pm}) \}, \quad (\text{B.19})$$

bzw. durch Integration:

$$\begin{aligned} \delta_{\alpha\beta} - \zeta_{\alpha\beta}(X; X^{\pm}) &= \int_X^{\infty} dx \zeta'_{\alpha\beta}(x; X^{\pm}) \\ &= - \sum_{\gamma} \int_X^{\infty} dx \{ Z_{\alpha\gamma}^+ g_{\beta\gamma}^+(x; X^{\pm}) - Z_{\alpha\gamma}^- g_{\beta\gamma}^-(x; X^{\pm}) \}. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Da man die Energiedichte (4.60) nur bis zur zweiten Ordnung in δX_{α}^{\pm} entwickelt hat, kann man in den obigen Gleichungen die FERMI-Punkte X_{α}^{\pm} durch die des Grundzustandes $\pm X_{0,\alpha}$ ersetzen. Die dabei auftretenden Korrekturen lassen sich vernachlässigen, da sie von der Ordnung $(\delta X_{\alpha}^{\pm})^3$ sind. Aufgrund der Symmetrieeigenschaften

$$\begin{aligned} \partial_{n_{\beta}} X_{\alpha}^+ |_{X^{\pm}=X_0^{\pm}} &= -\partial_{n_{\beta}} X_{\alpha}^- |_{X^{\pm}=X_0^{\pm}}, \\ \partial_{d_{\beta}} X_{\alpha}^+ |_{X^{\pm}=X_0^{\pm}} &= \partial_{d_{\beta}} X_{\alpha}^- |_{X^{\pm}=X_0^{\pm}}, \\ \sigma_{\alpha}(\pm X_{0,\alpha}) &= \sigma_{\alpha}(X_{0,\alpha}^+; X_0^{\pm}) = \sigma_{\alpha}(X_{0,\alpha}^-; X_0^{\pm}), \\ Z_{\alpha,\beta} &= Z_{\alpha\beta}^+ |_{X^{\pm}=X_0^{\pm}} = Z_{\alpha\beta}^- |_{X^{\pm}=X_0^{\pm}}, \\ T_{\alpha\beta}(x - X_{0,\beta}) &= T_{\alpha\beta}(-x + X_{0,\beta}), \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

kann Gleichung (B.20) noch weiter zu

$$\delta_{\alpha\beta} - Z_{\alpha,\beta} = - \sum_{\gamma} Z_{\alpha\beta} \left(\int_{X_{0,\beta}}^{\infty} - \int_{-\infty}^{-X_{0,\beta}} \right) dx g_{\alpha\beta}^{\pm}(x) \quad (\text{B.22})$$

und durch Invertierung sogar zu

$$Z_{\alpha\beta}^{-1} - \delta_{\alpha\beta} = - \left(\int_{X_{0,\beta}}^{\infty} - \int_{-\infty}^{-X_{0,\beta}} \right) dx g_{\alpha\beta}^{\pm}(x) \quad (\text{B.23})$$

vereinfacht werden. Ausgehend von

$$\begin{aligned} \delta_{\alpha\beta} &= \partial_{n_\beta} n_\alpha \\ &= \sum_{\gamma} \left\{ \partial_{n_\beta} X_\gamma^+ \partial_{X_\gamma^+} n_\alpha + \partial_{n_\beta} X_\gamma^- \partial_{X_\gamma^-} n_\alpha \right\} \\ &= \sum_{\gamma, s=\pm 1} \left\{ \sigma_\gamma(X_\gamma^s; X^\pm) \partial_{n_\beta} X_\gamma^s [s \delta_{\alpha, \gamma} + \int_{\alpha} dx g_{\alpha\gamma}^s(x; X^\pm)] \right\} \\ &= \sum_{\gamma, s=\pm 1} \left\{ Z_{\alpha\gamma}^s \sigma_\gamma(X_\gamma^s; X^\pm) \partial_{n_\beta} X_\gamma^s \right\} \\ &= \pm 2 \sum_{\gamma} Z_{\alpha\gamma} \sigma_\gamma(X_{0\gamma}) \partial_{n_\beta} X_\gamma^{\pm} |_{X^\pm = X_0^\pm} \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

bzw. von

$$\begin{aligned} \delta_{\alpha\beta} &= \partial_{d_\beta} d_\alpha \\ &= \sum_{\gamma} \left\{ \partial_{d_\beta} X_\gamma^+ \partial_{X_\gamma^+} d_\alpha + \partial_{d_\beta} X_\gamma^- \partial_{X_\gamma^-} d_\alpha \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\gamma, s=\pm} \sigma_\gamma(X_\gamma^s; X^\pm) \partial_{d_\beta} X_\gamma^s [\delta_{\alpha\gamma} - \left(\int_{X_\alpha^+}^{\infty} - \int_{-\infty}^{X_\alpha^-} \right) dx g_{\alpha\gamma}^s(x; X^\pm)] \\ &= \sum_{\gamma} Z_{\alpha\gamma}^{-1} \sigma_\gamma(X_{0,\gamma}) \partial_{d_\beta} X_\gamma^{\pm} |_{X^\pm = X_0^\pm} \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

erhält man die beiden in Kapitel 4 benötigten Formeln (4.64):

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(X_\alpha^\pm) \partial_{n_\beta} X_\alpha^\pm |_{X^\pm = X_0^\pm} &= \pm \frac{1}{2} (Z^{-1})_{\alpha\beta}, \\ \sigma_\alpha(X_\alpha^\pm) \partial_{d_\beta} X_\alpha^\pm |_{X^\pm = X_0^\pm} &= Z_{\beta\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Abschließend soll nun noch der Beitrag zu den *Finite-Size-Korrekturen* berechnet werden, der durch die Teilchen-Lochanregungen in der Nähe der jeweiligen FERMI-Punkte X_α^\pm entsteht. Dazu untersucht man zuerst exemplarisch das Verhalten eines Teilchen-Lochpaares am rechten FERMI-Punkt X_α^+ , das man mit Hilfe der Quantenzahlen $J_{p,\alpha}^+$ und $J_{h,\alpha}^-$ vollständig charakterisieren kann. Der Zusammenhang zwischen den Quantenzahlen und den reellen Zentren der Rapiditäten wird wie üblich mittels der Zählfunktionen $z_\alpha(x)$ hergestellt:

$$z_\alpha(X_{p,\alpha}) = \frac{J_{p,\alpha}}{L} \quad \text{und} \quad z_\alpha(X_{h,\alpha}) = \frac{J_{h,\alpha}}{L} \quad \text{mit} \quad X_{p,\alpha}^+ \approx X_{0,\alpha}^+ \approx X_{h,\alpha}^+. \quad (\text{B.27})$$

Verwendet man

$$X_{p,\alpha}^+ - X_{h,\alpha}^+ \simeq \frac{1}{L} \left(\frac{\partial z_\alpha(x)}{\partial x} \Big|_{X^\pm = X_0^\pm} \right)^{-1} (J_{p,\alpha}^+ - J_{h,\alpha}^+) = \frac{1}{L\sigma_\alpha(X_{0,\alpha}^+)} N_\alpha^+, \quad (\text{B.28})$$

so ergibt sich für die Energie eines Teilchen-Lochpaares der folgende Ausdruck:

$$\begin{aligned} \delta E &= \epsilon_\alpha(X_{p,\alpha}^+) - \epsilon_\alpha(X_{h,\alpha}^+) \\ &= \frac{\partial \epsilon_\alpha(x)}{\partial x} \Big|_{X^\pm = X_0^\pm} (X_{p,\alpha}^+ - X_{h,\alpha}^+) \\ &= \frac{2\pi}{L} \frac{\epsilon_\alpha'(X_{0,\alpha}^+)}{2\pi\sigma_\alpha(X_{0,\alpha}^+)} N_\alpha^+ \\ &= \frac{2\pi}{L} v_\alpha N_\alpha^+. \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Wegen der Additivität der jeweiligen Beiträge ist die Verallgemeinerung auf beliebige und beliebig viele Teilchen-Lochanregungen offensichtlich. δE ist daher gegeben durch

$$\delta E = \frac{2\pi}{L} \sum_\alpha v_\alpha \{N_\alpha^+ + N_\alpha^-\} \quad (\text{B.30})$$

mit

$$N_\alpha^+ = \sum_l (J_{p,\alpha,l}^+ - J_{h,\alpha,l}^+) \quad \text{und} \quad N_\alpha^- = \sum_l (J_{p,\alpha,l}^- - J_{h,\alpha,l}^-), \quad (\text{B.31})$$

wobei die Quantenzahlen $J_{p,\alpha,l}^+ (J_{h,\alpha,l}^+)^+$ bzw. $J_{p,\alpha,l}^- (J_{h,\alpha,l}^-)^-$ die Teilchen (Löcher) in der Nähe des rechten (+) bzw. linken (-) FERMI-Punktes der Anregungsmode ϵ_α charakterisieren. Analog dazu kann man auch die durch die Teilchen-Lochanregung verursachten Korrekturen zum Impuls berechnen und findet:

$$\delta P = \frac{2\pi}{L} \sum_\alpha (N_\alpha^+ - N_\alpha^-). \quad (\text{B.32})$$

ANHANG C

Freies Boson

Die einfachste konforme Feldtheorie in zwei Raumzeitdimensionen ist die eines freien, masselosen, skalaren Bosons ϕ , dessen Wirkung gerade durch

$$S[\phi, A] = \frac{1}{2} \int_A d^2x \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi \quad (\text{C.1})$$

gegeben ist. A ist hier eine beliebige Teilmenge von \mathbb{R}^2 [5, 88]. Für $A = \mathbb{R}^2$ ist die Wirkung (C.1) nur dann wohldefiniert, wenn man $S[\phi; \mathbb{R}^2]$ sowohl für große als für auch kleine Abstände regularisiert. Dazu führt man als *Ultraviolett-Cut-Off* eine Gitterkonstante a ein und betrachtet den \mathbb{R}^2 als den Grenzfall einer Scheibe vom Radius R . Die GREENSche-Funktion G des freien Bosons genügt der zweidimensionalen LAPLACE-Gleichung mit den obigen Nebenbedingungen. Mit Hilfe der beiden komplexen Koordinaten $z = x^0 + ix^1$, $\bar{z} = x^0 - ix^1$ läßt sich G wie folgt schreiben [88]:

$$G(z, \bar{z}) = \frac{1}{4\pi} \ln \left[\frac{R^2}{z\bar{z} + a^2} \right]. \quad (\text{C.2})$$

Ausgehend von dieser Form des Propagators sieht man, daß man den formal holomorphen bzw. antiholomorphen Anteil getrennt voneinander betrachten kann. Berechnet man die Operatorproduktentwicklung (OPE) von $\partial\phi \equiv \partial_z \phi(z)$ mit sich selbst, so ergibt sich:

$$\partial\phi(z) \partial\phi(w) \sim -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{(z-w)^2}. \quad (\text{C.3})$$

Der Energie-Impuls-Tensors $T(z)$ des freien Bosons ist gegeben durch [5]:

$$T_{\mu\nu} = \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi - \frac{1}{2} \eta_{\mu\nu} \partial_\gamma \partial^\gamma \phi. \quad (\text{C.4})$$

Die dazu korrespondierende Quanten-Version des holomorphen Anteils beträgt gerade:

$$\begin{aligned} T(z) &= -2\pi : \partial\phi(z) \partial\phi(z) : \\ &= -2\pi \lim_{w \rightarrow z} \{ \partial\phi(z) \partial\phi(w) - \langle \partial\phi(z) \partial\phi(w) \rangle \}. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Mit Hilfe des WICKschen Theorems kann man nun die OPE von $T(z)$ mit dem Operator $\partial\phi$ bzw. mit sich selbst berechnen [6]:

$$\begin{aligned} T(z) \partial\phi(w) &= -2\pi : \partial\phi(z) \partial\phi(z) : \partial\phi(w) \\ &\sim -4\pi : \partial\phi(z) \overline{\partial\phi(z)} : \partial\phi(w) \\ &\sim \frac{\partial\phi(z)}{(z-w)^2} \\ &\sim \frac{\partial\phi(w)}{(z-w)^2} + \frac{\partial_w^2 \phi(w)}{(z-w)}, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned}
T(z)T(w) &= 4\pi^2 : \partial\phi(z) \partial\phi(z) : : \partial\phi(w) \partial\phi(w) : \\
&\sim \frac{1/2}{(z-w)^4} - \frac{4\pi : \partial\phi(z) \partial\phi(w)}{(z-w)^2} \\
&\sim \frac{1/2}{(z-w)^4} - \frac{2T(w)}{(z-w)^2} + \frac{\partial T(w)}{(z-w)}. \tag{C.7}
\end{aligned}$$

Gleichung (C.6) zeigt, daß $\partial\phi$ ein primäres Feld mit konformer Dimension $\Delta = 1$ ist. Dies ist nicht weiter verwunderlich, da ein freies, masseloses und skalares Boson ϕ keinen Spin s und keine Skalendimension d besitzt. Vergleicht man (C.7) mit dem allgemeinen Ausdruck aus Kapitel 3 für die OPE von $T(z)T(w)$, so läßt sich die zentrale Ladung c des freien Bosons zu $c = 1$ bestimmen. Analoge Überlegungen gelten auch für den formal antiholomorphen Anteil $\bar{\partial}\phi(\bar{z})$ und $\bar{T}(\bar{z})$.

Ausgehend von einem bosonischen Feld $\phi(z, \bar{z})$ ist es möglich eine weitere Klasse lokaler Operatoren $\mathcal{V}_\beta(z, \bar{z})$ zu konstruieren, die die Skaleninvarianz des Systems nicht verletzen:

$$\mathcal{V}_\beta(z, \bar{z}) = : e^{i\beta\phi(z, \bar{z})} :. \tag{C.8}$$

Mit Hilfe des erzeugenden Funktional

$$Z[\eta(z, \bar{z})]/Z[0] = \exp \left\{ \frac{1}{2} \int d^2 z_1 \int d^2 z_2 \eta(z_1, \bar{z}_1) G(z_{12}, \bar{z}_{12}) \eta(z_2, \bar{z}_2) \right\} \tag{C.9}$$

kann man die Korrelationsfunktionen dieser sogenannten Vertex-Operatoren $\mathcal{V}_\beta(z, \bar{z})$ durch die spezielle Wahl $\eta(z, \bar{z})$

$$\eta(z, \bar{z}) = \eta_0(z, \bar{z}) = i \sum_{n=1}^N \beta_n \delta(z - z_n) \delta(\bar{z} - \bar{z}_n) \tag{C.10}$$

berechnen:

$$Z[\eta_0(z, \bar{z})]/Z[0] = \langle \mathcal{V}_{\beta_1}(z_1, \bar{z}_1) \dots \mathcal{V}_{\beta_N}(z_N, \bar{z}_N) \rangle. \tag{C.11}$$

Ersetzt man $\eta(z, \bar{z})$ in (C.9) durch (C.10) und verwendet noch die explizite Form für die GREENsche-Funktion (C.2), so ergibt sich der Korrelator zu:

$$Z[\eta_0(z, \bar{z})]/Z[0] = \prod_{i>j} \left(\frac{z_{ij} \bar{z}_{ij}}{a^2} \right)^{\beta_i \beta_j / 4\pi} \left(\frac{R}{a} \right)^{-(\sum_n \beta_n)^2 / 4\pi}. \tag{C.12}$$

Dieser Ausdruck verschwindet im Grenzfall $R \rightarrow \infty$ genau dann nicht, wenn die sogenannte Neutralitätsbedingung

$$\sum_{n=1}^N \beta_n = 0 \tag{C.13}$$

erfüllt ist. Man sieht, daß sich die Korrelationsfunktionen (C.11) wieder als ein Produkt eines formal holomorphen und antiholomorphen Anteils schreiben lassen

$$\langle \mathcal{V}_{\beta_1}(z_1, \bar{z}_1) \dots \mathcal{V}_{\beta_N}(z_N, \bar{z}_N) \rangle = \mathcal{G}(z_1, \dots, z_N) \mathcal{G}(\bar{z}_1, \dots, \bar{z}_N) \delta_{0, \sum_n \beta_n} \tag{C.14}$$

mit

$$\mathcal{G}(z_1, \dots, z_N) = \prod_{i>j} \left(\frac{z_{ij}}{a} \right)^{\beta_i \beta_j / 4\pi}. \quad (\text{C.15})$$

Führt man das zu $\phi(z, \bar{z})$ duale Feld $\theta(z, \bar{z})$ ein

$$\begin{aligned} \phi(z, \bar{z}) &\sim \varphi(z) + \bar{\varphi}(\bar{z}), \quad \partial_z \phi(z, \bar{z}) = \partial_z \theta(z, \bar{z}), \\ \theta(z, \bar{z}) &\sim \varphi(z) - \bar{\varphi}(\bar{z}), \quad \partial_{\bar{z}} \phi(z, \bar{z}) = -\partial_{\bar{z}} \theta(z, \bar{z}), \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

so kann man jeden Vertex-Operator $\mathcal{V}_\beta(z, \bar{z})$ in einen holomorphen und antiholomorphen bzw. einen links und rechts chiralen Vertex-Operator zerlegen:

$$\mathcal{V}_\beta(z, \bar{z}) \sim V_\beta(z) \otimes \bar{V}_\beta(\bar{z}), \quad (\text{C.17})$$

wobei $V_\beta(z)$ bzw. $\bar{V}_\beta(\bar{z})$ wie folgt definiert sind:

$$\begin{aligned} V_\beta(z) &= : \exp \left\{ \frac{i}{2} \beta [\phi(z, \bar{z}) + \theta(z, \bar{z})] \right\} : , \\ \bar{V}_\beta(\bar{z}) &= : \exp \left\{ \frac{i}{2} \beta [\phi(z, \bar{z}) - \theta(z, \bar{z})] \right\} : . \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Die obigen Zerlegungen (C.16) und (C.17) sind jedoch nur auf der Ebene der Korrelationsfunktionen gültig.

Da die Operatoren $V_\beta(z)$ bzw. $\bar{V}_\beta(\bar{z})$ eine Basis bilden, kann man jedes lokale Funktional $\mathcal{F}(\phi, \theta)$, das periodisch in ϕ und θ mit den Perioden T_1 und T_2 ist, in eine FOURIER-Reihe entwickeln:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\phi, \theta) &= \sum_{n,m} \mathcal{F}_{n,m} \exp \{ (2\pi i n / T_1) \phi + (2\pi i m / T_2) \theta \} \\ &= \sum_{n,m} \mathcal{F}_{n,m} V_{\beta_{n,m}}(z) \bar{V}_{\bar{\beta}_{n,m}}(\bar{z}) \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

mit

$$\beta_{n,m} = 2\pi \left(\frac{n}{T_1} + \frac{m}{T_2} \right) \quad \text{und} \quad \bar{\beta}_{n,m} = 2\pi \left(\frac{n}{T_1} - \frac{m}{T_2} \right). \quad (\text{C.20})$$

Der Zusammenhang zwischen den Koeffizienten $\beta_{n,m}$, $\bar{\beta}_{n,m}$ und den physikalischen Größen, wie den konformen Dimensionen Δ^+ , Δ^- bzw. den Skalendimensionen d und konformen Spins s , läßt sich mit Hilfe der verallgemeinerten Paarkorrelationsfunktionen bestimmen:

$$\begin{aligned} \langle V_\beta(z_1) \otimes \bar{V}_{\bar{\beta}}(\bar{z}_1) V_{-\beta}(z_2) \otimes \bar{V}_{-\bar{\beta}}(\bar{z}_2) \rangle &= (z_{12})^{-\beta^2/4\pi} (\bar{z}_{12})^{-\bar{\beta}^2/4\pi} \\ &= \frac{1}{|z_{12}|^{2d}} \left(\frac{z_{12}}{\bar{z}_{12}} \right)^{-s}, \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

d.h.

$$\begin{aligned} d &= \Delta^+ + \Delta^- = \frac{1}{8\pi} (\beta^2 + \bar{\beta}^2), \\ s &= \Delta^+ - \Delta^- = \frac{1}{8\pi} (\beta^2 - \bar{\beta}^2). \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

Da die Korrelationsfunktionen (C.21) in der komplexen Ebene eindeutig sein müssen, also insbesondere keinerlei *Branch-Cut*-Singulartäten aufweisen dürfen, kann der konforme Spin eines physikalischen Feldes nur ganz- oder halbzahlige Werte annehmen. Dies läßt sich für beliebige $\beta_{n,m}$ und $\bar{\beta}_{n,m}$ nur dann erreichen, wenn die Perioden T_1 und T_2 folgender Relation genügen:

$$T_2 = \frac{4\pi}{T_1}. \quad (\text{C.23})$$

Somit sind die konformen Dimensionen der Basisoperatoren $V_{\beta_{n,m}}(z)$ bzw. $\bar{V}_{\bar{\beta}_{n,m}}(\bar{z})$ gerade:

$$\begin{aligned} \Delta_{n,m}^+ &\equiv \beta_{n,m}^2/8\pi = \frac{\pi}{2} \left(\frac{n}{T_1} + \frac{mT_1}{4\pi} \right)^2, \\ \Delta_{n,m}^- &\equiv \bar{\beta}_{n,m}^2/8\pi = \frac{\pi}{2} \left(\frac{n}{T_1} - \frac{mT_1}{4\pi} \right)^2. \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

Literaturverzeichnis

- [1] C. C. Tsuei und J. R. Kirtley. Pairing symmetry in cuprate superconductors. *Rev. Mod. Phys.* **72**, 969 (2000).
- [2] H. L. Störmer, D. C. Tsui und A. C. Gossard. The fractional quantum Hall effect. *Rev. Mod. Phys.* **71**, S298 (1999).
- [3] P. Fulde. *Electron correlations in molecules and solids* volume 100 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer-Verlag Berlin-Heidelberg 1995.
- [4] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan und A. M. Tsvelik. *Bosonization and Strongly Correlated Systems*. Cambridge University Press 1998.
- [5] P. Di Francesco, P. Mathieu und D. Sénéchal. *Conformal Field Theory*. Springer-Verlag New York 1997.
- [6] A. A. Belavin, A. M. Polyakov und A. B. Zamolodchikov. Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory. *Nucl. Phys. B* **241**, 333 (1984).
- [7] S. R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [8] S. R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [9] P. A. Serena und N. Garcia. *Nanowires* volume 340 of *NATO ASI, Ser. E*. Kluwer Dordrecht 1997.
- [10] P. M. Ajayan und T. W. Ebbesen. Nanometer-size tubes of carbon. *Rep. Prog. Phys.* **60**, 1025 (1997).
- [11] O. M. Ausländer, A. Yacoby, R. de Picciotto, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer und K. W. West. Experimental evidence for resonant tunneling in a Luttinger liquid. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1764 (2000).
- [12] L. D. Faddeev und L. A. Takhtajan. What is the spin of a spin wave? *Phys. Lett. A* **85**, 375 (1981).
- [13] H. Frahm und V. E. Korepin. Critical exponents for the one-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. B* **42**, 10553 (1990).
- [14] H. Frahm und V. E. Korepin. Correlation functions for the one-dimensional Hubbard model in a magnetic field. *Phys. Rev. B* **43**, 5653 (1991).
- [15] V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov und A. G. Izergin. *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*. Cambridge University Press 1993.
- [16] H. Bethe. Zur Theorie der Metalle I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der Linearen Atomkette. *Zeitschrift für Physik* **71**, 205 (1931).

- [17] L. Hulthén. Über das Austauschproblem eines Kristalls. *Ark. Mat. Astron. Fys. B* **26A**, 1 (1938).
- [18] J. Des Cloizeaux und J. J. Pearson. Spin-wave spectrum of the antiferromagnetic chain. *Phys. Rev* **128**, 2131 (1962).
- [19] C. N. Yang und Y. P. Yang. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. I: Proof of Bethe's hypothesis for ground state in finite systems. *Phys. Rev.* **150**, 321 (1966).
- [20] C. N. Yang und C. P. Yang. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. II. Properties of the ground state energy per lattice site for an infinite system. *Phys. Rev.* **150**, 327 (1966).
- [21] C. N. Yang und C. P. Yang. One dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. III. Applications. *Phys. Rev.* **151**, 258 (1966).
- [22] R. J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press New York 1982.
- [23] J. D. Johnson, S. Krinsky und B. M. McCoy. Vertical-arrow correlation length in the eight-vertex model and the low-lying excitations of the XYZ Hamiltonian. *Phys. Rev. A* **8**, 2526 (1973).
- [24] E. H. Lieb und W. Liniger. Exact analysis of an interacting Bose gas I. *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963).
- [25] E. H. Lieb. Exact analysis of an interacting Bose gas II. The excitation spectrum. *Phys. Rev.* **130**, 1616 (1963).
- [26] E. H. Lieb und F. Y. Wu. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range one-band model in one-dimension. *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [27] M. Takahashi. One-dimensional Hubbard model at finite temperature. *Prog. Theor. Phys.* **47**, 69 (1972).
- [28] C. K. Lai. Lattice gas with nearest-neighbor interaction in one dimension with arbitrary statistics. *J. Math. Phys.* **15**, 1675 (1972).
- [29] B. Sutherland. Model for a multicomponent quantum system. *Phys. Rev. B* **12**, 3795 (1975).
- [30] A. M. Tsvelick und P. B. Wiegmann. Exact results in the theory of magnetic alloys. *Adv. Phys.* **32**, 453 (1983).
- [31] A. Andrei, K. Furuya und J. H. Lowenstein. Solution of the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.* **55**, 331 (1983).
- [32] L. D. Faddeev und L. A. Takhtajan. *Hamiltonian Methods in the Theory of Solitons*. Springer-Verlag Berlin-Heidelberg 1987.
- [33] F. Göhmann und V. E. Korepin. Solution of the quantum inverse problem. *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, 1199 (2000).
- [34] J. L. Cardy. Operator content of two-dimensional conformally invariant theories. *Nucl. Phys. B* **270**, 186 (1986).

- [35] I. Affleck. Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 746 (1986).
- [36] H. W. Blöte, J. L. Cardy und M. P. Nightingale. Conformal invariance, the central charge and universal finite-size amplitudes at criticality. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 742 (1986).
- [37] A. Berkovich und G. Murthy. Operator dimensions and surface exponents for the nonlinear Schrödinger model at $T=0$. *J. Phys. A* **21**, 3703 (1988).
- [38] F. H. L. Eßler und V. E. Korepin. Higher conservation laws and algebraic Bethe ansätze for the supersymmetric t - J model. *Phys. Rev. B* **46**, 9147 (1992).
- [39] L. A. Takhtajan. The picture of low-lying excitations in the isotropic Heisenberg chain of arbitrary spins. *Phys. Lett. A* **87**, 479 (1982).
- [40] H. M. Babujian. Exact solution of the one-dimensional isotropic Heisenberg chain with arbitrary spin S . *Phys. Lett. A* **90**, 479 (1982).
- [41] H. M. Babujian. Exact solution of the isotropic Heisenberg chain with arbitrary spins. *Nucl. Phys. B* **215**, 317 (1983).
- [42] J.F. Cornwell. *Group theory in physics* volume III of *Techniques of Physics*. Academic Press 1989.
- [43] Z. Maassarani. U_q -osp(2,2) lattice models. *J. Phys. A* **28**, 1305 (1995).
- [44] M. P. Pfannmüller und H. Frahm. Algebraic Bethe ansatz for $gl(2,1)$ invariant 36-vertex models. *Nucl. Phys. B* **479**, 575 (1996).
- [45] H. Frahm. Doped Heisenberg chains: spin s generalizations of the supersymmetric t - J model. *Nucl. Phys. B* **559**, 613 (1999).
- [46] C. N. Yang und C. P. Yang. Thermodynamics of a one-dimensional system of bosons with repulsive delta-function interaction. *J. Math. Phys.* **10**, 1115 (1969).
- [47] H. Frahm und C. Sobiella. Doping induced magnetization plateaus. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 10533 (99).
- [48] M. Oshikawa, M. Yamanaka und I. Affleck. Magnetization plateaus in spin chains: Haldane gap for half integer spins. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
- [49] K. Hida. Magnetic properties of the spin-1/2 ferromagnetic-ferromagnetic-antiferromagnetic trimerized Heisenberg chain. *J. Phys. Soc. Japan* **63**, 2359 (1994).
- [50] K. Okamoto. Plateau of the magnetization curve of the $S=1/2$ ferromagnetic-ferromagnetic-antiferromagnetic spin chain. *Solid State Commun.* **98**, 245 (1996).
- [51] D. C. Cabra, A. Honecker und P. Pujol. Magnetization curves of antiferromagnetic Heisenberg spin-1/2 ladders. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5126 (1997).
- [52] K. Totsuka. Magnetization plateau in the $S=1/2$ Heisenberg chain with next-nearest-neighbor and alternating nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. B* **57**, 3454 (1998).
- [53] T. Sakai und M. Takahashi. Magnetization plateau in a $S=3/2$ antiferromagnetic Heisenberg chain with anisotropy. *Phys. Rev. B* **57**, R3201 (1998).

- [54] D. C. Cabra, A. Honecker und P. Pujol. Magnetization plateaus in N -leg spin ladders. *Phys. Rev. B* **58**, 6241 (1998).
- [55] T. Momoi, H. Sakamoto und K. Kubo. Magnetization plateau in a two-dimensional multiple-spin exchange model. *Phys. Rev. B* **59**, 9491 (1999).
- [56] T. Sakai und Y. Hasegawa. Magnetization plateau in the spin ladder with a four-spin exchange. *Phys. Rev. B* **60**, 48 (1999).
- [57] D. C. Cabra, A. De Martino, A. Honecker, P. Pujol und P. Simon. Doping-dependent magnetization plateaus in p -merized Hubbard chains. *Physics Letters A* **268**, 418 (2000).
- [58] D. C. Cabra, A. De Martino, A. Honecker, P. Pujol und P. Simon. Emergence of irrationality: Magnetization plateaus in modulated Hubbard chains. *Phys. Rev. B* **63**, 094406 (2001).
- [59] L. D. Faddeev. Quantum inverse scattering method. *Sov. Sci. Rev. Math. C* **1**, 107 (1980).
- [60] E. K. Sklyanin, L. A. Takhtajan und L. D. Faddeev. Quantum inverse problem method I. *Theor. Math. Phys.* **40**, 688 (1980).
- [61] M. Scheunert, W. Nahm und V. Rittenberg. Irreducible representations of the $ops(2, 1)$ and $spl(2, 1)$ graded Lie algebras. *J. Math. Phys.* **18**, 155 (1977).
- [62] M. Marcu. The representations of $spl(2, 1)$ - an example of representations of basic superalgebras. *J. Math. Phys.* **21**, 1277 (1980).
- [63] C. N. Yang. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1312 (1967).
- [64] B. S. Shastry. Infinite conservation laws in a one-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1529 (1986).
- [65] B. S. Shastry. Exact integrability of the one-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2454 (1986).
- [66] E. Olmedilla und M. Wadati. Conserved quantities of the one-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1595 (1988).
- [67] F. Göhmann und S. Murakami. Algebraic and analytic properties of the one-dimensional Hubbard model. *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 5269 (1997).
- [68] P. Schlottmann. Integrable narrow-band model with possible relevance to heavy fermion systems. *Phys. Rev. B* **36**, 5177 (1987).
- [69] H. Frahm, M. P. Pfannmüller und A. M. Tsvelik. Doping of a spin-1 chain: Integrable model. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2116 (1998).
- [70] K. Penc und H. Shiba. Propagating $S=1/2$ particles in $S=1$ Haldane-gap systems. *Phys. Rev. B* **52**, R715 (1995).
- [71] J. F. DiTusa. Magnetic and charge dynamics in a doped one-dimensional transition metal oxide. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1857 (1994).

- [72] E. Dagotto, J. Riera, A. Sandvik und A. Moreo. Spin dynamics of hole doped $\text{Y}_{2-x}\text{Ca}_x\text{BaNiO}_5$. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1731 (1996).
- [73] E. Müller-Hartmann und E. Dagotto. Electronic Hamiltonian for transition-metal oxide compounds. *Phys. Rev. B* **54**, R6819 (1996).
- [74] J. Riera, K. Hallberg und E. Dagotto. Phase diagram of electronic models of transition metal oxides in one dimension. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 714 (1997).
- [75] A. Foerster und M. Karowski. Algebraic properties of the Bethe ansatz for an $\text{spl}(2, 1)$ -supersymmetric t - J model. *Nucl. Phys. B* **396**, 611 (1993).
- [76] M. Takahashi. One-dimensional Heisenberg model at finite temperature. *Prog. Theor. Phys.* **46**, 401 (1971).
- [77] J. Wess und B. Zumino. Consequences of anomalous Ward identities. *Phys. Lett.* **37B**, 95 (1971).
- [78] E. Witten. Nonabelian bosonization. *Comm. Math. Phys.* **92**, 45 (1984).
- [79] H. Frahm und N. A. Slavnov. Magnetic properties of doped Heisenberg chains. *Nucl. Phys. B* **575**, 485 (2000).
- [80] L. D. Faddeev und L. A. Takhtajan. Spectrum and scattering of excitations in the one-dimensional isotropic Heisenberg model. *J. Sov. Math.* **24**, 241 (1984).
- [81] P. A. Bares und G. Blatter. Supersymmetric t - J model in one dimension: Separation of spin and charge. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2567 (1990).
- [82] P. A. Bares, G. Blatter und M. Ogata. Exact solution of the t - J model in one dimension at $2t=\pm J$: ground state and excitation spectrum. *Phys. Rev. B* **44**, 130 (1991).
- [83] H. J. Schulz. Critical behavior of commensurate-incommensurate phase transition in two dimension. *Phys. Rev. B* **22**, 5274 (1980).
- [84] N. M. Bogoliubov und V. E. Korepin. Correlation length of one-dimensional Bose gas. *Nucl. Phys. B* **257**, 766 (1985).
- [85] A. M. Polyakov. Conformal symmetry of critical fluctuations. *JETO Lett.* **12**, 381 (1970).
- [86] D. Friedan, Z. Qiu und S. Shenker. Conformal invariance, unitarity and critical exponents in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1575 (1984).
- [87] F. Woynarovich. Finite size effects in a non-half-filled Hubbard chain. *J. Phys. A* **22**, 4243 (1989).
- [88] A. M. Tsvelik. *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press 1995.
- [89] N. M. Bogoliubov, A. G. Izergin und V. E. Korepin. Critical exponents for integrable models. *Nucl. Phys. B* **275**, 687 (1986).
- [90] F. H. L. Eßler und H. Frahm. Density correlations in the half-filled Hubbard model. *Phys. Rev. B* **60**, 8540 (1999).
- [91] M. Scheunert, W. Nahm und V. Rittenberg. Classification of all simple graded Lie algebras whose Lie algebra is reductive. I. *J. Math. Phys.* **17**, 1626 (1976).

- [92] M. Scheunert, W. Nahm und V. Rittenberg. Classification of all simple graded Lie algebras whose Lie algebra is reductive. II. Construction of exceptional algebras. *J. Math. Phys.* **17**, 1640 (1976).
- [93] M. Marcu. The tensor product of two irreducible representations of the $spl(2, 1)$ superalgebra. *J. Math. Phys.* **21**, 1284 (1980).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich zunächst bei Herrn Prof. Dr. H. Frahm für die Vergabe des Themas sowie die vielen wertvollen Anregungen und nützlichen Hinweise während der Promotion bedanken.

Besonderer Dank gilt auch M. Stahlsmeier für die zahlreichen aufschlußreichen Diskussionen und Gespräche sowie für die entspannte Atmosphäre im Büro.

Weiterhin möchte ich mich bei A. Bernert, A. Bredthauer und M. Müller für ihre Mühe und Sorgfalt beim Korrekturlesen dieser Arbeit bedanken.

Lebenslauf

Geburtsdatum/-ort	24.11.1972 in Heidelberg
Schulausbildung	Martin-Stöhr-Grundschule in Hirschberg 08/1979 - 07/1983 Kurfürst-Friedrich-Gymnasium in Heidelberg 08/1983 - 05/1992 Schulabschluß: Abitur
Hochschulausbildung	Physikstudium an der Universität Heidelberg: 10/1992-12/1997 Diplomarbeit am Institut für Theoretische Physik der Universität Heidelberg bei Prof. Dr. H. Horner Thema: „Dynamik eines Teilchens in einem eindimensionalen Gitter“, 11/1996-12/1997 Abschluß mit Diplom 22.12.1997 Mitglied des Graduiertenkollegs: „Quantenfeldtheoretische Methoden in der Teilchenphysik, Gravitation und Statistischen Physik“ des Instituts für Theoretische Physik der Universität Hannover seit 07/1998 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik der Universität Hannover seit 07/2001
Veröffentlichungen	Holger Frahm und Constantin Sobiella, <i>Doping induced magnetization plateaus</i> , Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 10533